

JP 2003-306454

DERWENT-ACC-NO: 2003-903112

DERWENT-WEEK: 200382

COPYRIGHT 1999 DERWENT INFORMATION LTD

TITLE: New asymmetric anthracene compounds  
useful in luminescence layers of  
electroluminescence element used  
for light source of electronic  
instrument

INVENTOR: FUNAHASHI, M; HOSOKAWA, C ; IKEDA, H ; MATSUURA, M

PATENT-ASSIGNEE: IDEMITSU KOSAN CO LTD[IDEK]

PRIORITY-DATA: 2002JP-0114400 (April 17, 2002)

PATENT-FAMILY:

PUB-NO	PAGES	MAIN-IPC	PUB-DATE	LANGUAGE
WO 2003087023	A1		October 23, 2003	J
	069	C07C 015/60		
JP 2003306454	A		October 28, 2003	N/A
	027	C07C 015/60		

DESIGNATED-STATES: CN IN KR US AT BE BG CH CY CZ DE DK EE ES  
FI FR GB GR HU IE  
IT LU MC NL PT RO SE SI SK TR

APPLICATION-DATA:

PUB-NO	APPL-DATE	APPL-DESCRIPTOR	APPL-NO
WO2003087023A1	April 17, 2003	N/A	2003WO-JP04905
JP2003306454A	April 17, 2002	N/A	2002JP-0114400

INT-CL (IPC): C07C013/567, C07C013/66 , C07C015/60 ,  
C07C211/54 ,  
C07D209/86 , C07D215/04 , C09K011/06 , H05B033/14 ,  
H05B033/22

ABSTRACTED-PUB-NO: WO2003087023A

BASIC-ABSTRACT:

NOVELTY - Asymmetric anthracene compounds (I) are new.

DETAILED DESCRIPTION - Asymmetric anthracene compounds of formula (I) are new.

A-Ar-B (I)

Ar = anthracenediyl group;

B = 2-60C heterocyclic group substituted with an alkenyl or aryl amine group or a 5-60C aryl group;

A = group of formula (i)-(xi), which may be substituted with a 1-30C alkyl or phenyl group;

Ar1-Ar3 = 6-30C aryl group;

Ar4 = 6-30C arylene group;

Ar5 = 6-30C trivalent aromatic residue group; and

R1, R2 = H, halogen, OH, NH<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub>, CN, 1-30C alkyl, 2-40C alkenyl, 5-40C cycloalkyl, 1-30C alkoxy, 5-40C aromatic hydrocarbon, 2-40C aromatic heterocyclic, 7-40C aralkyl, 6-40C aryloxy, 2-30C alkoxy-carbonyl, 3-40C silyl or carboxyl group.

A is not a phenyl group substituted with an aryl amino group if B is substituted with an aryl amino group. Ar1 and Ar2, and R1 and R2 can independently bond to each other to form a ring-structure.

An INDEPENDENT CLAIM is also included for an organic electroluminescence element which comprises a negative electrode, a positive electrode and one or more organic thin-film layers sandwiched between the electrodes, and which contains a luminescence layer containing this aromatic

compound

USE - The anthracene compound is used for electroluminescence elements which are used as light sources of electronic instruments.

ADVANTAGE - Organic electroluminescence elements containing this aromatic compound can stably emit light having a high color purity with a high emission efficiency and have excellent durability and stability at a high temperature.

CHOSEN-DRAWING: Dwg.0/0

DERWENT-CLASS: E13 E14 L03 U11 U12 U14 X26

CPI-CODES: E06-D13; E06-H; E07-H03; E07-H04; E08-C02;  
E08-D02; L03-D01D;  
L03-G05F;

EPI-CODES: U11-A15B; U12-B03C; U14-J; X26-J;

----- KWIC -----

Patent Family Serial Number - PFPN (1):  
2003087023

Document Identifier - DID (1):  
WO 2003087023 A1

# PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 2003-306454

(43)Date of publication of application : 28.10.2003

---

(51)Int.Cl.

C07C 15/60  
C07C 13/567  
C07C211/54  
C09K 11/06  
H05B 33/14  
H05B 33/22

---

(21)Application number : 2002-114400

(71)Applicant : IDEMITSU KOSAN CO LTD

(22)Date of filing : 17.04.2002

(72)Inventor : IKEDA HIDEJI

MATSUURA MASAhide

FUNAHASHI MASAKAZU

HOSOKAWA CHISHIO

---

(54) NEW AROMATIC COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT USING THE SAME

(57)Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To obtain a new aromatic compound for providing an organic electroluminescent element which has a high emission luminance, luminous efficiency and color purity, emits a blue light and has an excellent high- temperature stability and a long life and the organic electroluminescent element using the compound.

SOLUTION: The new aromatic compound has an anthracene skeleton and an asymmetric molecular structure. In the organic electroluminescent element in which an organic thin film layer composed of one layer or a plurality of layers containing at least one luminous layer is laid between a cathode and an anode, at least one layer of the organic thin film layer contains the aromatic compound as a single component or a component of a mixture to give the organic electroluminescent element.

---

## LEGAL STATUS

[Date of request for examination]

[Date of sending the examiner's decision of rejection]

[Kind of final disposal of application other than the examiner's decision of rejection or application converted registration]

[Date of final disposal for application]

[Patent number]

[Date of registration]

[Number of appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of requesting appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of extinction of right]

Copyright (C); 1998,2003 Japan Patent Office

## \* NOTICES \*

Japan Patent Office is not responsible for any damages caused by the use of this translation.

1. This document has been translated by computer. So the translation may not reflect the original precisely.
2. \*\*\*\* shows the word which can not be translated.
3. In the drawings, any words are not translated.

## CLAIMS

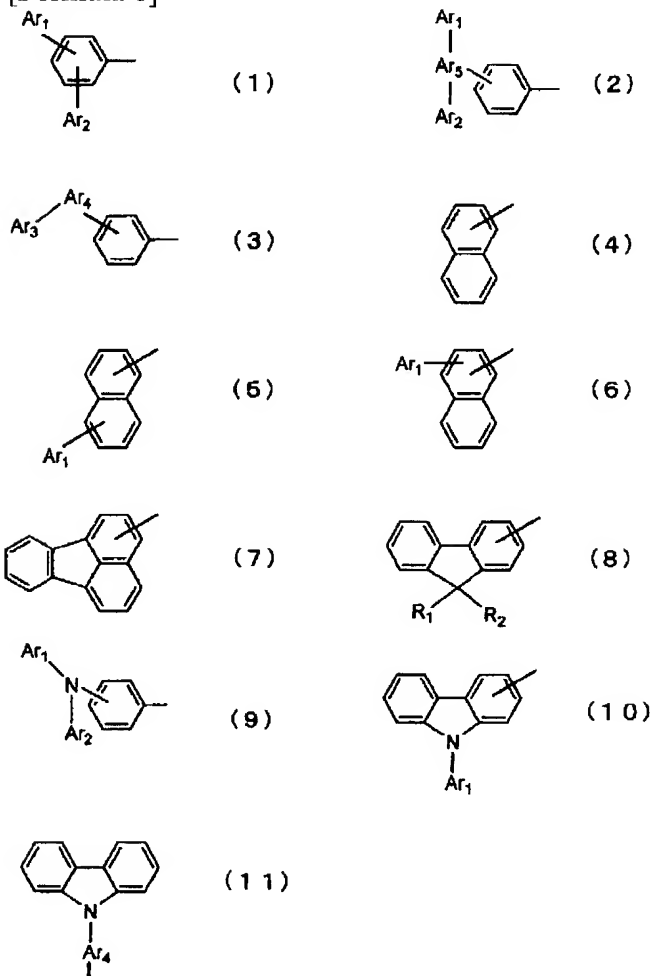
[Claim(s)]

[Claim 1] The new aromatic compound expressed with the following general formula (A).

A-Ar-B (A)

Ar is an anthracene deal radical which is not permuted [ a permutation or ] among [type. B is the aryl group of the carbon numbers 5-60 which are not permuted [ the heterocycle radical of the carbon numbers 2-60 which the alkenyl radical or the arylamino radical permuted one time, a permutation, or ]. A is a radical chosen from following general formula (1) - (11), and may be permuted by the phenyl group which is not permuted [ the alkyl group of the carbon numbers 1-30 which are not permuted / a permutation or /, a permutation, or ]. However, when B is permuted by the arylamino radical, A is not the phenyl group permuted by the arylamino radical.

[Formula 1]



(Ar1 -Ar3 of the aryl group of the carbon numbers 6-30 which are not permuted [ a permutation or ] and Ar4 is [ the arylene radical of the carbon numbers 6-30 which are not permuted / a permutation or / and Ar5 ] the

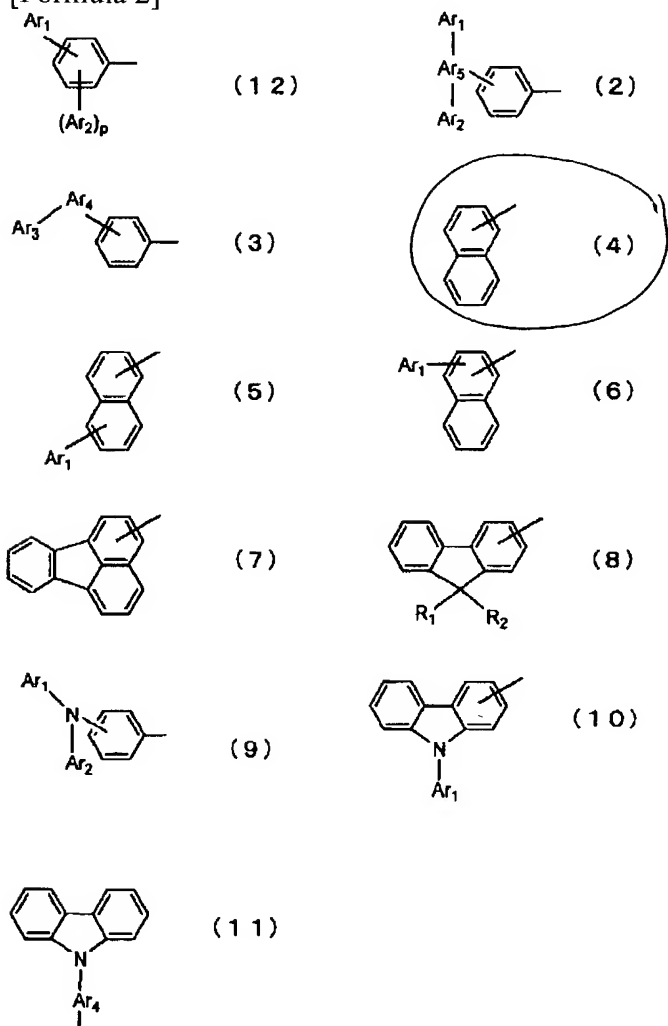
trivalent aromatic series residue of the carbon numbers 6-30 which are not permuted [ a permutation or ] independently among a formula, respectively.) R1 And R2 Independently, respectively A hydrogen atom, a halogen atom, hydroxyl, The alkyl group of the carbon numbers 1-30 which are not permuted [ the amino group which is not permuted / a permutation or /, a nitro group, a cyano group, a permutation, or ], The cycloalkyl radical of the carbon numbers 5-40 which are not permuted [ the alkenyl radical of the carbon numbers 2-40 which are not permuted / a permutation or /, a permutation or ], The aromatic hydrocarbon radical of the carbon numbers 5-40 which are not permuted [ the alkoxy group of the carbon numbers 1-30 which are not permuted / a permutation or /, a permutation, or ], The aralkyl radical of the carbon numbers 7-40 which are not permuted [ the aromatic series heterocycle radical of the carbon numbers 2-40 which are not permuted / a permutation or / a permutation, or ], They are the silyl radical of the carbon numbers 3-40 which are not permuted [ the ARUKOSHIKI carbonyl group of the carbon numbers 2-30 which are not permuted / the aryloxy group of the carbon numbers 6-40 which are not permuted / a permutation or /, a permutation, or /, a permutation or ], or a carboxyl group. Moreover, Ar1 Ar2 And R1 R2 It may join together mutually respectively independently and cyclic structure may be formed. ]

[Claim 2] The new aromatic compound expressed with the following general formula (B).

A'-Ar-Ar-B (B)

Ar is an anthracene deal radical which is not permuted [ a permutation or ] among [type. B is the aryl group of the carbon numbers 5-60 which are not permuted [ the heterocycle radical of the carbon numbers 2-60 which the alkenyl radical or the arylamino radical permuted one time, a permutation, or ]. A' is a radical chosen from following general formula (2) - (12), and may be permuted by the phenyl group which is not permuted [ the alkyl group of the carbon numbers 1-30 which are not permuted / a permutation or /, a permutation, or ]. However, when B is permuted by the arylamino radical, A' is not the phenyl group permuted by the arylamino radical.

[Formula 2]



(Ar1 -Ar3 of the aryl group of the carbon numbers 6-30 which are not permuted [ a permutation or ] and Ar4 is [ the arylene radical of the carbon numbers 6-30 which are not permuted / a permutation or / and Ar5 ] the trivalent aromatic series residue of the carbon numbers 6-30 which are not permuted [ a permutation or ] independently among a formula, respectively.) R1 And R2 Independently, respectively A hydrogen atom, a halogen atom, hydroxyl, The alkyl group of the carbon numbers 1-30 which are not permuted [ the amino group which is not permuted / a permutation or /, a nitro group, a cyano group, a permutation, or ], The cycloalkyl radical of the carbon numbers 5-40 which are not permuted [ the alkenyl radical of the carbon numbers 2-40 which are not permuted / a permutation or /, a permutation or ], The aromatic hydrocarbon radical of the carbon numbers 5-40 which are not permuted [ the alkoxy group of the carbon numbers 1-30 which are not permuted / a permutation or /, a permutation, or ], The aralkyl radical of the carbon numbers 7-40 which are not permuted [ the aromatic series heterocycle radical of the carbon numbers 2-40 which are not permuted / a permutation or / a permutation, or ], They are the silyl radical of the carbon numbers 3-40 which are not permuted [ the ARUKOSHIKI carbonyl group of the carbon numbers 2-30 which are not permuted / the aryloxy group of the carbon numbers 6-40 which are not permuted / a permutation or /, a permutation, or /, a permutation or ], or a carboxyl group. Moreover, Ar1 Ar2 And R1 R2 It may join together mutually respectively independently and cyclic structure may be formed. p of a formula (12) is 0 or 1. ]

[Claim 3] The new aromatic compound according to claim 1 or 2 which is a charge of organic electroluminescent element material.

[Claim 4] The organic electroluminescent element in which at least one layer of this organic thin film layer contains an aromatic compound according to claim 1 or 2 as a component of independent or mixture in the organic electroluminescent element by which the organic thin film layer which consists of one layer which contains a luminous layer at least, or two or more layers between cathode and an anode plate is pinched.

[Claim 5] The organic electroluminescent element in which said organic thin film layer has an electronic transportation layer and/or an electron hole transportation layer, and this electronic transportation layer and/or an electron hole transportation layer contain an aromatic compound according to claim 1 or 2 as components of independent or mixture.

[Claim 6] The organic electroluminescent element according to claim 4 or 5 in which said luminous layer contains an arylamine compound further.

[Claim 7] The organic EL device according to claim 4 or 5 with which said luminous layer contains a styryl amine compound further.

---

[Translation done.]



(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号  
特開2003-306454  
(P2003-306454A)

(43) 公開日 平成15年10月28日 (2003.10.28)

(51) Int.Cl. <sup>7</sup>	識別記号	F I	テマコード* (参考)
C 0 7 C 15/60		C 0 7 C 15/60	3 K 0 0 7
13/567		13/567	4 H 0 0 6
211/54		211/54	
C 0 9 K 11/06	6 1 5	C 0 9 K 11/06	6 1 5
	6 2 0		6 2 0

審査請求 未請求 請求項の数 7 O L (全 27 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2002-114400(P2002-114400)  
(22) 出願日 平成14年4月17日 (2002.4.17)

(71) 出願人 000183646  
出光興産株式会社  
東京都千代田区丸の内3丁目1番1号  
(72) 発明者 池田 秀嗣  
千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地  
(72) 発明者 松浦 正英  
千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地  
(72) 発明者 舟橋 正和  
千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地  
(74) 代理人 100078732  
弁理士 大谷 保

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 新規芳香族化合物及びそれを利用した有機エレクトロルミネッセンス素子

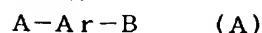
(57) 【要約】

【課題】 発光輝度及び発光効率が高く、色純度が高く、青色系に発光し、さらに高温安定性に優れ長寿命の有機E L素子を提供可能な新規芳香族化合物及びそれを利用した有機エレクトロルミネッセンス素子を提供する。

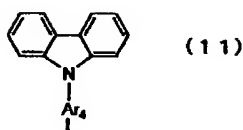
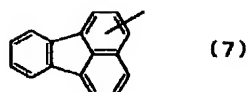
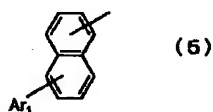
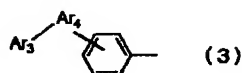
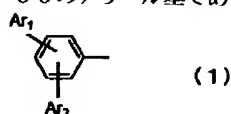
【解決手段】 アントラセン骨格を有し非対称な分子構造を有する新規芳香族化合物、及び、陰極と陽極間に少なくとも発光層を含む一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機エレクトロルミネッセンス素子において、該有機薄膜層の少なくとも1層が、前記芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有する有機エレクトロルミネッセンス素子である。

## 【特許請求の範囲】

【請求項1】 下記一般式(A)で表される新規芳香族化合物。

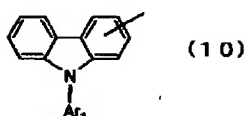
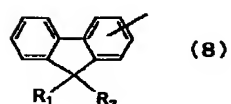
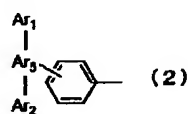


〔式中、Arは、置換もしくは無置換のアントラセンディール基である。Bは、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が1置換した炭素数2～60の複素環基又は置換もしくは無置換の炭素数5～60のアリール基であ \*



\*る。Aは、下記一般式(1)～(11)から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されている場合、Aはアリールアミノ基で置換されたフェニル基ではない。

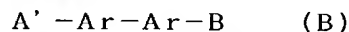
## 【化1】



(式中、Ar1～Ar3は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数6～30のアリール基、Ar4は置換もしくは無置換の炭素数6～30のアリーレン基、Ar5は置換もしくは無置換の炭素数6～30の3価の芳香族残基である。R1及びR2は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～40のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数5～40のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数5～40の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数2～40の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数7～40のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数6～40のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルコシカル※50

※ボニル基、置換もしくは無置換の炭素数3～40のシリル基、又はカルボキシ基である。また、Ar1とAr2及びR1とR2は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。)

40 【請求項2】 下記一般式(B)で表される新規芳香族化合物。

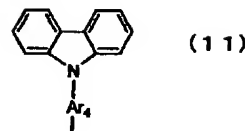
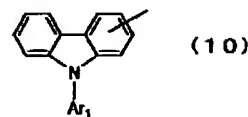
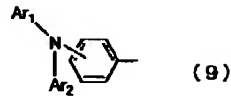
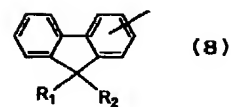
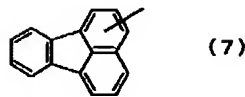
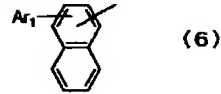
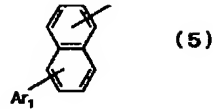
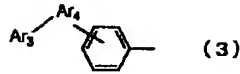
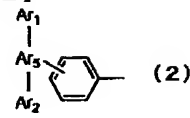
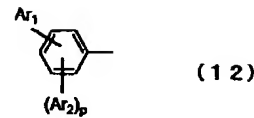


〔式中、Arは、置換もしくは無置換のアントラセンディール基である。Bは、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が1置換した炭素数2～60の複素環基又は置換もしくは無置換の炭素数5～60のアリール基である。A'は、下記一般式(2)～(12)から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されている場合、A'はアリールアミノ基で置換さ

れたフェニル基ではない。

3

\* \* 【化2】



(式中、Ar<sub>1</sub> ~ Ar<sub>3</sub> は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数6~30のアリール基、Ar<sub>4</sub> は置換もしくは無置換の炭素数6~30のアリーレン基、Ar<sub>5</sub> は置換もしくは無置換の炭素数6~30の3価の芳香族残基である。R<sub>1</sub> 及びR<sub>2</sub> は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2~40のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数5~40のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数5~40の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数2~40の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数7~40のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数6~40のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数3~40のシリル基、又はカルボキシル基である。また、Ar<sub>1</sub> とAr<sub>2</sub> 及びR<sub>1</sub> とR<sub>2</sub> は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。式(12)のpは、0又は1である。))

【請求項3】 有機エレクトロルミネッセンス素子用材※50

※料である請求項1又は2に記載の新規芳香族化合物。

30 【請求項4】 陰極と陽極間に少なくとも発光層を含む一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機エレクトロルミネッセンス素子において、該有機薄膜層の少なくとも1層が、請求項1又は2に記載の芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有する有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項5】 前記有機薄膜層が、電子輸送層及び/又は正孔輸送層を有し、該電子輸送層及び/又は正孔輸送層が、請求項1又は2に記載の芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有する有機エレクトロルミネッセンス素子。

40 【請求項6】 前記発光層が、さらにアリールアミン化合物を含有する請求項4又は5に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項7】 前記発光層が、さらにスチリルアミン化合物を含有する請求項4又は5に記載の有機EL素子。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、新規な芳香族化合物及びそれを利用した有機エレクトロルミネッセンス素子(有機EL素子)に関し、特に、発光輝度及び発光効

率が高く、色純度が高く、青色系に発光し、さらに高温安定性に優れ長寿命の有機EL素子を提供可能な新規芳香族化合物及びそれを利用した有機EL素子に関するものである。

#### 【0002】

【従来の技術】有機EL素子は、電界を印加することにより、陽極より注入された正孔と陰極より注入された電子の再結合エネルギーにより蛍光性物質が発光する原理を利用した自発光素子である。イーストマン・コダック社のC. W. Tangらによる積層型素子による低電圧駆動有機EL素子の報告(C.W. Tang, S.A. Vanslyke, アプライドフィジックスレターズ(Applied Physics Letters), 51巻, 913頁, 1987年等) がなされて以来、有機材料を構成材料とする有機EL素子に関する研究が盛んに行われている。Tangらは、トリス(8-ヒドロキシキノリン)アルミニウムを発光層に、トリフェニルジアミン誘導体を正孔輸送層に用いている。積層構造の利点としては、発光層への正孔の注入効率を高めること、陰極より注入された電子をブロックして再結合により生成する励起子の生成効率を高めること、発光層内で生成した励起子を閉じ込めること等が挙げられる。この例のように有機EL素子の素子構造としては、正孔輸送(注入)層、電子輸送発光層の2層型、または正孔輸送(注入)層、発光層、電子輸送(注入)層の3層型等がよく知られている。こうした積層型構造素子では注入された正孔と電子の再結合効率を高めるため、素子構造や形成方法の工夫がなされている。また、発光材料としてはトリス(8-キノリン)アルミニウム錯体等のキレート錯体、クマリン誘導体、テトラフェニルブタジエン誘導体、ビススチリルアレーン誘導体、オキサジアゾール誘導体等の発光材料が知られており、それらからは青色から赤色までの可視領域の発光が得られることが報告されており、カラー表示素子の実現が期待されている(例えば、特開平8-239655号公報、特開平7-138561号公報、特開平3-200289号公報等)。また、発光材料としてフェニルアントラセン誘導体を用いた素子は特開平8-012600に開示されている。このようなアントラセン誘導体は青色発光材料として用いられるが、さらに高効率発光が求められていた。一方、素子寿命を伸ばすように薄膜の安

定性が求められており、従来のアントラセン誘導体は結晶化し薄膜が破壊される場合が多く改善が求められていた。例えば、米国特許0593571号明細書には、ジナフチルアントラセン化合物が開示されている。しかしこの化合物は左右及び上下の対称性の分子構造であるため、高温保存及び高温駆動において容易に配列し結晶化が生じる。また、特開2000-273056号公報に左右非対称のアリルアントラセン化合物が開示されているが、アントラセンジールに置換する基の一方が、単純なフェニル基やビフェニル基であり結晶化を防ぐことはできなかった。

#### 【0003】

【発明が解決しようとする課題】本発明は、前記の課題を解決するためになされたもので、発光輝度及び発光効率が高く、色純度が高く、青色系に発光し、さらに高温安定性に優れ長寿命の有機EL素子を提供可能な新規芳香族化合物及びそれを利用した有機EL素子を提供することを目的とする。

#### 【0004】

【課題を解決するための手段】本発明者らは、前記課題を解決するために鋭意検討した結果、高ガラス転移温度であり、かつ非対称な分子構造を保有する化合物を有機EL素子の有機薄膜層の材料として用いることにより、前記の課題を解決することを見出し本発明を解決するに至った。

【0005】すなわち、本発明は、下記一般式(A)又は(B)で表される新規な芳香族化合物である。

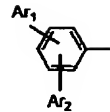


〔式中、Arは、置換もしくは無置換のアントラセンジール基である。Bは、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が1置換した炭素数2~60の複素環基又は置換もしくは無置換の炭素数5~60のアリール基である。Aは、下記一般式(1)~(11)から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されているもよい。但し、Bがアリールアミノ基で置換されている場合は、Aはアリールアミノ基で置換されたフェニル基ではない。〕

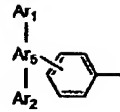
#### 【0006】

【化3】

7



(1)



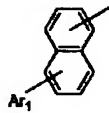
(2)



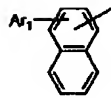
(3)



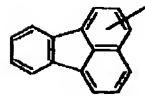
(4)



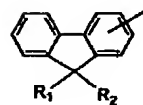
(5)



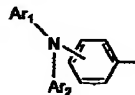
(6)



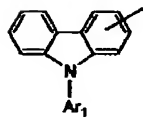
(7)



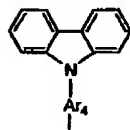
(8)



(9)



(10)



(11)

【0007】(式中、 $Ar_1 \sim Ar_3$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数6~30のアリール基、 $Ar_4$  は置換もしくは無置換の炭素数6~30のアリーレン基、 $Ar_5$  は置換もしくは無置換の炭素数6~30の3価の芳香族残基である。 $R_1$  及び $R_2$  は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2~40のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数5~40のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数5~40の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数2~40の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数7~40のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数6~40のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素\*

\* 素数3~40のシリル基、又はカルボキシル基である。また、 $Ar_1$  と $Ar_2$  及び $R_1$  と $R_2$  は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。)

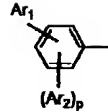
【0008】 $A' - Ar - Ar - B$  (B)

〔式中、 $Ar$  は、置換もしくは無置換のアントラセンデイル基である。 $B$  は、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が1置換した炭素数2~60の複素環基又は置換もしくは無置換の炭素数5~60のアリール基である。 $A'$  は、下記一般式(2)~(12)から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されていてもよい。但し、 $B$  がアリールアミノ基で置換されている場合は、 $A'$  はアリールアミノ基で置換されたフェニル基ではない。〕

【0009】

【化4】

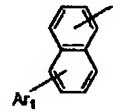
9



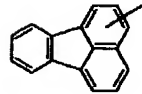
(12)



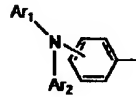
(3)



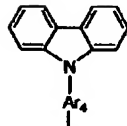
(5)



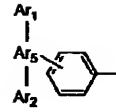
(7)



(9)



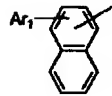
(11)



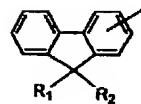
(2)



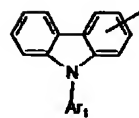
(4)



(6)



(8)



(10)

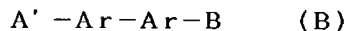
【0010】(式中、 $Ar_1 \sim Ar_3$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数6~30のアリール基、 $Ar_4$  は置換もしくは無置換の炭素数6~30のアリーレン基、 $Ar_5$  は置換もしくは無置換の炭素数6~30の3価の芳香族残基である。 $R_1$  及び $R_2$  は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2~40のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数5~40のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数5~40の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数2~40の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数7~40のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数6~40のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数3~40のシリル基、又はカルボキシ基である。また、 $Ar_1$  と $Ar_2$  及び $R_1$  と $R_2$  は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。式(12)のpは、0又は1である。))

【0011】また、本発明は、陰極と陽極間に少なくとも発光層を含む一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟

\*持されている有機エレクトロルミネッセンス素子において、該有機薄膜層の少なくとも1層が、前記一般式(A)又は(B)で表される芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有する有機エレクトロルミネッセンス素子を提供するものである。

【0012】

【発明の実施の形態】本発明は、下記一般式(A)又は(B)で表される新規な芳香族化合物である。



上記一般式(A)又は(B)において、 $Ar$ は、置換もしくは無置換のアントラセンディール基である。上記一般式(A)又は(B)において、 $B$ は、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が1置換した炭素数2~60の複素環基又は置換もしくは無置換の炭素数5~60のアリール基である。

【0013】 $B$ の置換基であるアルケニル基としては、例えば、ビニル基、アリル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、1, 3-ブタンジエニル基、1-メチルビニル基、スチリル基、2, 2-ジフェニルビニル基、2, 2-ジトリルビニル基、1, 2-ジトリルビニル基、1-メチルアリル基、1-ジメチルアリル基、2-メチルアリル基、1-フェニルアリル基、

30

40

50

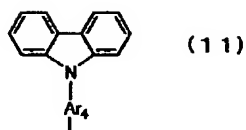
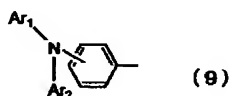
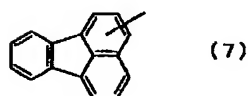
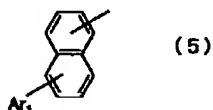
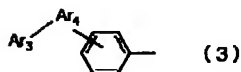
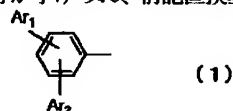
10

20

8-フェナンスロリン-6-イル基、1, 8-フェナンスロリン-7-イル基、1, 8-フェナンスロリン-9-イル基、1, 8-フェナンスロリン-10-イル基、1, 9-フェナンスロリン-2-イル基、1, 9-フェナンスロリン-3-イル基、1, 9-フェナンスロリン-4-イル基、1, 9-フェナンスロリン-5-イル基、1, 9-フェナンスロリン-6-イル基、1, 9-フェナンスロリン-7-イル基、1, 9-フェナンスロリン-8-イル基、1, 9-フェナンスロリン-10-イル基、1, 10-フェナンスロリン-2-イル基、1, 10-フェナンスロリン-3-イル基、1, 10-フェナンスロリン-4-イル基、1, 10-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-1-イル基、2, 9-フェナンスロリン-3-イル基、2, 9-フェナンスロリン-4-イル基、2, 9-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-6-イル基、2, 9-フェナンスロリン-7-イル基、2, 9-フェナンスロリン-8-イル基、2, 9-フェナンスロリン-10-イル基、2, 8-フェナンスロリン-1-イル基、2, 8-フェナンスロリン-3-イル基、2, 8-フェナンスロリン-4-イル基、2, 8-フェナンスロリン-5-イル基、2, 8-フェナンスロリン-6-イル基、2, 8-フェナンスロリン-7-イル基、2, 8-フェナンスロリン-9-イル基、2, 8-フェナンスロリン-10-イル基、2, 7-フェナンスロリン-1-イル基、2, 7-フェナンスロリン-3-イル基、2, 7-フェナンスロリン-4-イル基、2, 7-フェナンスロリン-5-イル基、2, 7-フェナンスロリン-6-イル基、2, 7-フェナンスロリン-8-イル基、2, 7-フェナンスロリン-9-イル基、2, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1-フェナジニル基、2-フェナジニル基、1-フェノチアジニル基、2-フェノチアジニル基、3-フェノチアジニル基、4-フェノチアジニル基、10-フェノチアジニル基、1-フェノキサジニル基、2-フェノキサジニル基、3-フェノキサジニル基、4-フェノキサジニル基、10-フェノキサジニル基、2-オキサゾリル基、4-オキサゾリル基、5-オキサゾリル基、2-オキサジアゾリル基、5-オキサジアゾリル基、3-フラザニル基、2-チエニル基、3-チエニル基、2-メチルピロール-1-イル基、2-メチルピロール-3-イル基、2-メチルピロール-4-イル基、2-メチルピロール-5-イル基、3-メチルピロール-1-イル基、3-メチルピロール-2-イル基、3-メチルピロール-4-イル基、3-メチルピロール-5-イル基、2-トプチルピロール-4-イル基、3-(2-フェニルプロピル)ピロール-1-イル基、2-メチル-1-インドリル基、4-メチル-1-インドリル基、2-メチル-3-インドリル基、4-メチル-3-インドリル基、2-トプチル-1-インドリル基、4-トプチル

1-インドリル基、2-トープチル3-インドリル基、4-トープチル3-インドリル基等が挙げられ、前記置換基を含み炭素数2~60のものである。

【0015】Bのアリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、アントラニル基、フェナンスリル基、ビレニル基、コロニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ピローリル基、フラニル基、チオフェニル基、ベンゾチオフェニル基、オキサジアゾリル基、ジフェニルアントラニル基、インドリル基、カルバゾリル基、ピリジル基、ベンゾキノリル基、フルオランテニル基、アセナフトフルオランテニル基等が挙げられ、前記置換基\*



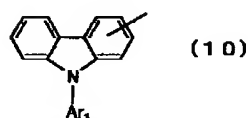
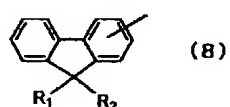
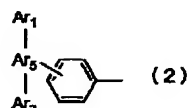
【0018】(1)~(11)式中、Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>3</sub>は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数6~30のアリール基、Ar<sub>4</sub>は置換もしくは無置換の炭素数6~30のアリーレン基、Ar<sub>5</sub>は置換もしくは無置換の炭素数6~30の3価の芳香族残基である。R<sub>1</sub>及びR<sub>2</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2~40のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数5~40のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数5~40の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素※50

\*を含み炭素数5~60のものである。

【0016】上記一般式(A)において、Aは、下記一般式(1)~(11)から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されていてもよい。但し、Bがアリールアミノ基で置換されている場合は、Aはアリールアミノ基で置換されたフェニル基ではない。

【0017】

【化5】



※数2~40の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数7~40のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数6~40のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数3~40のシリル基、又はカルボキシ基である。また、Ar<sub>1</sub>とAr<sub>2</sub>及びR<sub>1</sub>とR<sub>2</sub>は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。

【0019】Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>3</sub>の置換もしくは無置換の炭素数6~30のアリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、アントラニル基、フェナンスリル基、ビレニル基、コロニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ピローリル基、フラニル基、チオフェニル基、ベン



ゾチオフェニル基、オキサジアゾリル基、ジフェニルアントラニル基、インドリル基、カルバゾリル基、ヒリジル基、ベンゾキノリル基、フルオランテニル基、アセナフトフルオランテニル基等が挙げられる。

【0020】Ar<sub>1</sub> の置換もしくは無置換の炭素数6〜30のアリーレン基としては、フェニレン基、ナフチレン基、アントラニレン基、フェナンスリレン基、ビレニレン基、コロニレン基、ピフェニレン基、ターフェニレン基、ピローリレン基、フラニレン基、チオフェニレン基、ベンゾチオフェニレン基、オキサジアゾリレン基、ジフェニルアントラニレン基、インドリレン基、カルバゾリレン基、ヒリジレン基、ベンゾキノリレン基、フルオランテニレン基、アセナフトフルオランテニレン基等が挙げられる。

【0021】R<sub>1</sub> 及びR<sub>2</sub> のハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素が挙げられる。R<sub>1</sub> 及びR<sub>2</sub> の置換もしくは無置換のアミノ基としては、-NX<sub>1</sub>X<sub>2</sub> と表され、X<sub>1</sub>、X<sub>2</sub> の例としてはそれぞれ独立に、水素原子、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシt-ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロエチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロt-ブチル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモt-ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨードt-ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノt-ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノt-ブチル基、1, 2, 3-トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、2-ニトロイソブチル基、1, 2-ジニトロエチル基、1, 3-ジニトロイソプロピル基、2, 3-ジニトロt-ブ

チル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントリル基、2-アントリル基、9-アントリル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、4-スチリルフェニル基、1-ビレニル基、2-ビレニル基、4-ビレニル基、2-ビフェニルイル基、3-ビフェニルイル基、4-ビフェニルイル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、o-トリル基、m-トリル基、p-トリル基、p-t-ブチルフェニル基、p-(2-フェニルプロピル)フェニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、4-メチル-1-アントリル基、4'-メチルビフェニルイル基、4"-t-ブチル-p-ターフェニル-4-イル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベンゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、2-キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノリル基、4-イソキノリル基、5-イソキノリル基、6-イソキノリル基、7-イソキノリル基、8-イソキノリル基、2-キノキサリニル基、5-キノキサリニル基、6-キノキサリニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、1-フェナンスリジニル基、2-フェナンスリジニル基、3-フェナンスリジニル基、4-フェナンスリジニル基、6-フェナンスリジニル基、7-フェナンスリジニル基、8-フェナンスリジニル基、9-フェナンスリジニル基、10-フェナンスリジニル基、1-アクリジニル基、2-アクリジニル基、3-アクリジニル基、4-アクリジニル基、9-アクリジニル基、1, 7-フェナンスロリン-2-イル基、1, 7-フェナンスロリン-3-イル基、1, 7-フェナンスロリン-4-イル基、1, 7-フェナンスロリン-5-イル基、1, 7-フェナンスロリン-6-イル基、1, 7-フェ

ナンスロリン-8-イル基、1, 7-フェナンスロリン-9-イル基、1, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1, 8-フェナンスロリン-2-イル基、1, 8-フェナンスロリン-3-イル基、1, 8-フェナンスロリン-4-イル基、1, 8-フェナンスロリン-5-イル基、1, 8-フェナンスロリン-6-イル基、1, 8-フェナンスロリン-7-イル基、1, 8-フェナンスロリン-9-イル基、1, 8-フェナンスロリン-10-イル基、1, 9-フェナンスロリン-2-イル基、1, 9-フェナンスロリン-3-イル基、1, 9-フェナンスロリン-4-イル基、1, 9-フェナンスロリン-5-イル基、1, 9-フェナンスロリン-6-イル基、1, 9-フェナンスロリン-7-イル基、1, 9-フェナンスロリン-8-イル基、1, 9-フェナンスロリン-10-イル基、1, 10-フェナンスロリン-2-イル基、1, 10-フェナンスロリン-3-イル基、1, 10-フェナンスロリン-4-イル基、1, 10-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-1-イル基、2, 9-フェナンスロリン-3-イル基、2, 9-フェナンスロリン-4-イル基、2, 9-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-6-イル基、2, 9-フェナンスロリン-7-イル基、2, 9-フェナンスロリン-8-イル基、2, 9-フェナンスロリン-10-イル基、2, 8-フェナンスロリン-1-イル基、2, 8-フェナンスロリン-3-イル基、2, 8-フェナンスロリン-4-イル基、2, 8-フェナンスロリン-5-イル基、2, 8-フェナンスロリン-6-イル基、2, 8-フェナンスロリン-7-イル基、2, 8-フェナンスロリン-9-イル基、2, 8-フェナンスロリン-10-イル基、2, 7-フェナンスロリン-1-イル基、2, 7-フェナンスロリン-3-イル基、2, 7-フェナンスロリン-4-イル基、2, 7-フェナンスロリン-5-イル基、2, 7-フェナンスロリン-6-イル基、2, 7-フェナンスロリン-8-イル基、2, 7-フェナンスロリン-9-イル基、2, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1-フェナジニル基、2-フェナジニル基、1-フェノチアジニル基、2-フェノチアジニル基、3-フェノチアジニル基、4-フェノチアジニル基、1-フェノキサジニル基、2-フェノキサジニル基、3-フェノキサジニル基、4-フェノキサジニル基、2-オキサゾリル基、4-オキサゾリル基、5-オキサゾリル基、2-オキサジアゾリル基、5-オキサジアゾリル基、3-フラザニル基、2-チエニル基、3-チエニル基、2-メチルピロール-1-イル基、2-メチルピロール-3-イル基、2-メチルピロール-4-イル基、2-メチルピロール-5-イル基、3-メチルピロール-1-イル基、3-メチルピロール-2-イル基、3-メチルピロール-4-イル基、3-メチルピロール-5-イル基、2-ト-ブチルピロール-4-イル基、3-(2-フェ

ニルプロピル) ピロール-1-イル基、2-メチル-1-インドリル基、4-メチル-1-インドリル基、2-メチル-3-インドリル基、4-メチル-3-インドリル基、2-ト-ブチル-1-インドリル基、4-ト-ブチル-1-インドリル基、2-ト-ブチル-3-インドリル基、4-ト-ブチル-3-インドリル基等が挙げられる。

【0022】R<sub>1</sub> 及びR<sub>2</sub> の置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基の例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシト-ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロエチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロト-ブチル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、ブromoメチル基、1-ブromoエチル基、2-ブromoエチル基、2-ブromoイソブチル基、1, 2-ジブromoエチル基、1, 3-ジブromoイソプロピル基、2, 3-ジブromoト-ブチル基、1, 2, 3-トリブromoプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨードト-ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノト-ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノト-ブチル基、1, 2, 3-トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、2-ニトロイソブチル基、1, 2-ジニトロエチル基、1, 3-ジニトロイソプロピル基、2, 3-ジニトロト-ブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基等が挙げられる。

【0023】R<sub>1</sub> 及びR<sub>2</sub> の置換もしくは無置換の炭素数2~40のアルケニル基の例としては、ビニル基、アリル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、1, 3-ブタンジエニル基、1-メチルビニル基、スチリル基、2, 2-ジフェニルビニル基、2, 2-ジトリルビニル基、1, 2-ジトリルビニル基、1-メチルアリル基、1-ジメチルアリル基、2-メチルアリル基、1-フェニルアリル基、2-フェニルアリル基、3-フェニルアリル基、3, 3-ジフェニルアリル

基、1, 2-ジメチルアリル基、1-フェニル-1-ブテニル基、3-フェニル-1-ブテニル基等が挙げられる。R<sub>1</sub> 及びR<sub>2</sub> の置換もしくは無置換の炭素数5~40のシクロアルキル基としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、4-メチルシクロヘキシル基等が挙げられる。

【0024】R<sub>1</sub> 及びR<sub>2</sub> の置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルコキシ基としては、-OYで表される基であり、Yの例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシt-ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロエチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロt-ブチル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、プロモメチル基、1-プロモエチル基、2-プロモエチル基、2-プロモイソブチル基、1, 2-ジプロモエチル基、1, 3-ジプロモイソプロピル基、2, 3-ジプロモt-ブチル基、1, 2, 3-トリプロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨードt-ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノt-ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノt-ブチル基、1, 2, 3-トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、2-ニトロイソブチル基、1, 2-ジニトロエチル基、1, 3-ジニトロイソプロピル基、2, 3-ジニトロt-ブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基等が挙げられる。

【0025】R<sub>1</sub> 及びR<sub>2</sub> の置換もしくは無置換の炭素数5~40の芳香族炭化水素基の例としては、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントリル基、2-アントリル基、9-アントリル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ビレニル基、2-ビレニル基、4-ビレ

ニル基、2-ビフェニルイル基、3-ビフェニルイル基、4-ビフェニルイル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、o-トリル基、m-トリル基、p-トリル基、p-ターブチルフェニル基、p-(2-フェニルプロピル)フェニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、4-メチル-1-アントリル基、4'-メチルビフェニルイル基、4"-ターブチル-p-ターフェニル-4-イル基等が挙げられる。

【0026】R<sub>1</sub> 及びR<sub>2</sub> の置換もしくは無置換の炭素数2~40の芳香族複素環基の例としては、1-ピロリル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、1-インドリル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、2-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベンゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、2-キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノリル基、4-イソキノリル基、5-イソキノリル基、6-イソキノリル基、7-イソキノリル基、8-イソキノリル基、2-キノキサリニル基、5-キノキサリニル基、6-キノキサリニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、9-カルバゾリル基、1-フェナンスリジニル基、2-フェナンスリジニル基、3-フェナンスリジニル基、4-フェナンスリジニル基、6-フェナンスリジニル基、7-フェナンスリジニル基、8-フェナンスリジニル基、9-フェナンスリジニル基、10-フェナンスリジニル基、1-アクリジニル基、2-アクリジニル基、3-アクリジニル基、4-アクリジニル基、9-アクリジニル基、1, 7-フェナンスロリン-2-イル基、1, 7-フェナンスロリン-3-イル基、1, 7-フェナンスロリン-4-イル基、1, 7-フェナンスロリン-5-イル基、1, 7-フェナンスロリン-6-イル基、1, 7-フェナンスロリン-8-イル基、1, 7-フェナンスロリン-9-イル基、1, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1, 8-フェナンスロリン-2-イル基、1, 8-フェナンスロリン-3-イル基、

1, 8-フェナンスロリン-4-イル基、1, 8-フェナンスロリン-5-イル基、1, 8-フェナンスロリン-6-イル基、1, 8-フェナンスロリン-7-イル基、1, 8-フェナンスロリン-9-イル基、1, 8-フェナンスロリン-10-イル基、1, 9-フェナンスロリン-2-イル基、1, 9-フェナンスロリン-3-イル基、1, 9-フェナンスロリン-4-イル基、1, 9-フェナンスロリン-5-イル基、1, 9-フェナンスロリン-6-イル基、1, 9-フェナンスロリン-7-イル基、1, 9-フェナンスロリン-8-イル基、1, 9-フェナンスロリン-10-イル基、1, 10-フェナンスロリン-2-イル基、1, 10-フェナンスロリン-3-イル基、1, 10-フェナンスロリン-4-イル基、1, 10-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-1-イル基、2, 9-フェナンスロリン-3-イル基、2, 9-フェナンスロリン-4-イル基、2, 9-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-6-イル基、2, 9-フェナンスロリン-7-イル基、2, 9-フェナンスロリン-8-イル基、2, 9-フェナンスロリン-10-イル基、2, 8-フェナンスロリン-1-イル基、2, 8-フェナンスロリン-3-イル基、2, 8-フェナンスロリン-4-イル基、2, 8-フェナンスロリン-5-イル基、2, 8-フェナンスロリン-6-イル基、2, 8-フェナンスロリン-7-イル基、2, 8-フェナンスロリン-9-イル基、2, 8-フェナンスロリン-10-イル基、2, 7-フェナンスロリン-1-イル基、2, 7-フェナンスロリン-3-イル基、2, 7-フェナンスロリン-4-イル基、2, 7-フェナンスロリン-5-イル基、2, 7-フェナンスロリン-6-イル基、2, 7-フェナンスロリン-8-イル基、2, 7-フェナンスロリン-9-イル基、2, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1-フェナジニル基、2-フェナジニル基、1-フェノチアジニル基、2-フェノチアジニル基、3-フェノチアジニル基、4-フェノチアジニル基、10-フェノチアジニル基、1-フェノキサジニル基、2-フェノキサジニル基、3-フェノキサジニル基、4-フェノキサジニル基、10-フェノキサジニル基、2-オキサゾリル基、4-オキサゾリル基、5-オキサゾリル基、2-オキサジアゾリル基、5-オキサジアゾリル基、3-フラザニル基、2-チエニル基、3-チエニル基、2-メチルピロール-1-イル基、2-メチルピロール-3-イル基、2-メチルピロール-4-イル基、2-メチルピロール-5-イル基、3-メチルピロール-1-イル基、3-メチルピロール-2-イル基、3-メチルピロール-4-イル基、3-メチルピロール-5-イル基、2-*tert*-ブチルピロール-4-イル基、3-(2-フェニルアプロビル)ピロール-1-イル基、2-メチル-1-インドリル基、4-メチル-1-インドリル基、2-メチル-3-インドリル基、4-

メチル-3-インドリル基、2-*tert*-ブチル1-インドリル基、4-*tert*-ブチル1-インドリル基、2-*tert*-ブチル3-インドリル基、4-*tert*-ブチル3-インドリル基等が挙げられる。

【0027】 $R_1$  及び  $R_2$  の置換もしくは無置換の炭素数7~40のアラルキル基の例としては、ベンジル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-*tert*-ブチル基、 $\alpha$ -ナフチルメチル基、1- $\alpha$ -ナフチルエチル基、2- $\alpha$ -ナフチルエチル基、1- $\alpha$ -ナフチルイソプロピル基、2- $\alpha$ -ナフチルイソプロピル基、 $\beta$ -ナフチルメチル基、1- $\beta$ -ナフチルエチル基、2- $\beta$ -ナフチルエチル基、1- $\beta$ -ナフチルイソプロピル基、2- $\beta$ -ナフチルイソプロピル基、1-ピロリルメチル基、2-(1-ピロリル)エチル基、*p*-メチルベンジル基、*m*-メチルベンジル基、*o*-メチルベンジル基、*p*-クロロベンジル基、*m*-クロロベンジル基、*o*-クロロベンジル基、*p*-ブロモベンジル基、*m*-ブロモベンジル基、*o*-ブロモベンジル基、*p*-ヨードベンジル基、*m*-ヨードベンジル基、*o*-ヨードベンジル基、*p*-ヒドロキシベンジル基、*m*-ヒドロキシベンジル基、*o*-ヒドロキシベンジル基、*p*-アミノベンジル基、*m*-アミノベンジル基、*o*-アミノベンジル基、*p*-ニトロベンジル基、*m*-ニトロベンジル基、*o*-ニトロベンジル基、*p*-シアノベンジル基、*m*-シアノベンジル基、*o*-シアノベンジル基、1-ヒドロキシ-2-フェニルイソプロピル基、1-クロロ-2-フェニルイソプロピル基等が挙げられる。

【0028】 $R_1$  及び  $R_2$  の置換もしくは無置換の炭素数6~40のアリールオキシ基は、-OZと表され、Zの例としてはフェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントリル基、2-アントリル基、9-アントリル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ビレニル基、2-ビレニル基、4-ビレニル基、2-ビフェニルイル基、3-ビフェニルイル基、4-ビフェニルイル基、*p*-ターフェニル-4-イル基、*p*-ターフェニル-3-イル基、*p*-ターフェニル-2-イル基、*m*-ターフェニル-4-イル基、*m*-ターフェニル-3-イル基、*m*-ターフェニル-2-イル基、*o*-トリル基、*m*-トリル基、*p*-トリル基、*p*-*tert*-ブチルフェニル基、*p*-(2-フェニルアプロビル)フェニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、4-メチル-1-アントリル基、4'-メチルビフェニルイル基、4"-*tert*-ブチル-*p*-ターフェニル-4-イル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インド

リル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベンゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、2-キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノリル基、4-イソキノリル基、5-イソキノリル基、6-イソキノリル基、7-イソキノリル基、8-イソキノリル基、2-キノキサリル基、5-キノキサリル基、6-キノキサリル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、1-フェナンスリジニル基、2-フェナンスリジニル基、3-フェナンスリジニル基、4-フェナンスリジニル基、6-フェナンスリジニル基、7-フェナンスリジニル基、8-フェナンスリジニル基、9-フェナンスリジニル基、10-フェナンスリジニル基、1-アクリジニル基、2-アクリジニル基、3-アクリジニル基、4-アクリジニル基、9-アクリジニル基、1、7-フェナンスロリン-2-イル基、1、7-フェナンスロリン-3-イル基、1、7-フェナンスロリン-4-イル基、1、7-フェナンスロリン-5-イル基、1、7-フェナンスロリン-6-イル基、1、7-フェナンスロリン-8-イル基、1、7-フェナンスロリン-9-イル基、1、7-フェナンスロリン-10-イル基、1、8-フェナンスロリン-2-イル基、1、8-フェナンスロリン-3-イル基、1、8-フェナンスロリン-4-イル基、1、8-フェナンスロリン-5-イル基、1、8-フェナンスロリン-6-イル基、1、8-フェナンスロリン-7-イル基、1、8-フェナンスロリン-9-イル基、1、8-フェナンスロリン-10-イル基、1、9-フェナンスロリン-2-イル基、1、9-フェナンスロリン-3-イル基、1、9-フェナンスロリン-4-イル基、1、9-フェナンスロリン-5-イル基、1、9-フェナンスロリン-6-イル基、1、9-フェナンスロリン-7-イル基、1、9-フェナンスロリン-8-イル基、1、9-フェナンスロリン-10-イル基、1、10-フェナンスロリン-2-イル基、1、10-フェナンスロリン-3-イル基、1、10-フェナンスロリン-4-イル基、1、10-フェナンスロリン-5-イル基、2、9-フェナンスロリン-1-イル基、2、9-フェナンスロリン-3-イル基、2、9-フェナンスロリン-4-イル基、2、9-フェナンスロリン-5-イル基、2、9-フェナンス

ロリン-6-イル基、2、9-フェナンスロリン-7-イル基、2、9-フェナンスロリン-8-イル基、2、9-フェナンスロリン-10-イル基、2、8-フェナンスロリン-1-イル基、2、8-フェナンスロリン-3-イル基、2、8-フェナンスロリン-4-イル基、2、8-フェナンスロリン-5-イル基、2、8-フェナンスロリン-6-イル基、2、8-フェナンスロリン-7-イル基、2、8-フェナンスロリン-9-イル基、2、8-フェナンスロリン-10-イル基、2、7-フェナンスロリン-1-イル基、2、7-フェナンスロリン-3-イル基、2、7-フェナンスロリン-4-イル基、2、7-フェナンスロリン-5-イル基、2、7-フェナンスロリン-6-イル基、2、7-フェナンスロリン-8-イル基、2、7-フェナンスロリン-9-イル基、2、7-フェナンスロリン-10-イル基、1-フェナジニル基、2-フェナジニル基、1-フェノチアジニル基、2-フェノチアジニル基、3-フェノチアジニル基、4-フェノチアジニル基、1-フェノキサジニル基、2-フェノキサジニル基、3-フェノキサジニル基、4-フェノキサジニル基、2-オキサゾリル基、4-オキサゾリル基、5-オキサゾリル基、2-オキサジアゾリル基、5-オキサジアゾリル基、3-フラザニル基、2-チエニル基、3-チエニル基、2-メチルピロール-1-イル基、2-メチルピロール-3-イル基、2-メチルピロール-4-イル基、2-メチルピロール-5-イル基、3-メチルピロール-1-イル基、3-メチルピロール-2-イル基、3-メチルピロール-4-イル基、3-メチルピロール-5-イル基、2-トープチルピロール-4-イル基、3-(2-フェニルプロピル)ピロール-1-イル基、2-メチル-1-インドリル基、4-メチル-1-インドリル基、2-メチル-3-インドリル基、4-メチル-3-インドリル基、2-トープチル-1-インドリル基、4-トープチル-1-インドリル基、2-トープチル-3-インドリル基、4-トープチル-3-インドリル基等が挙げられる。

【0029】 $R_1$  及び  $R_2$  の置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルコキシカルボニル基は-COOYと表され、Yの例としてはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1、2-ジヒドロキシエチル基、1、3-ジヒドロキシイソプロピル基、2、3-ジヒドロキシ-*t*-ブチル基、1、2、3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1、2-ジクロロエチル基、1、3-ジクロロイソプロピル基、2、3-ジクロロ-*t*-ブチル基、1、2、3-トリクロロプロピル基、ブロモメチル基、

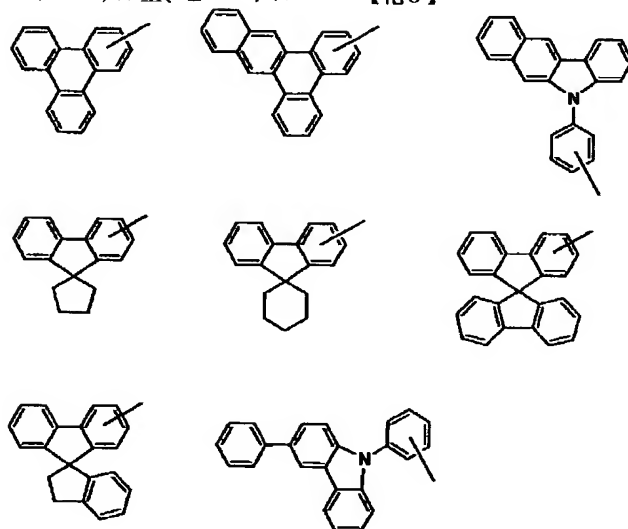
1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモ- $\alpha$ -ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨード- $\alpha$ -ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノ- $\alpha$ -ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノ- $\alpha$ -ブチル基、1, 2, 3-トリアシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロ\*

\*エチル基、2-ニトロイソブチル基、1, 2-ジニトロエチル基、1, 3-ジニトロイソプロピル基、2, 3-ジニトロ- $\alpha$ -ブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基等が挙げられる。

【0030】 $R_1$  及び  $R_2$  の置換もしくは無置換の炭素数3~40のシリル基の例としては、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリプロピルシリル基、トリブチルシリル基、トリペンチルシリル基、トリヘキシルシリル基、 $\alpha$ -ブチルジメチルシリル基等のトリアルキルシリル基の他、ジアルキルアリールシリル基、アルキルジアリールシリル基、トリアリールシリル基等が挙げられ、アルキル基及びアリール基としては、前記と同様のものが挙げられる。

【0031】 $Ar_1$  と  $Ar_2$  及び  $R_1$  と  $R_2$  が互いに結合し環状構造を形成する場合の例としては、下記のような構造が挙げられる。

【化6】

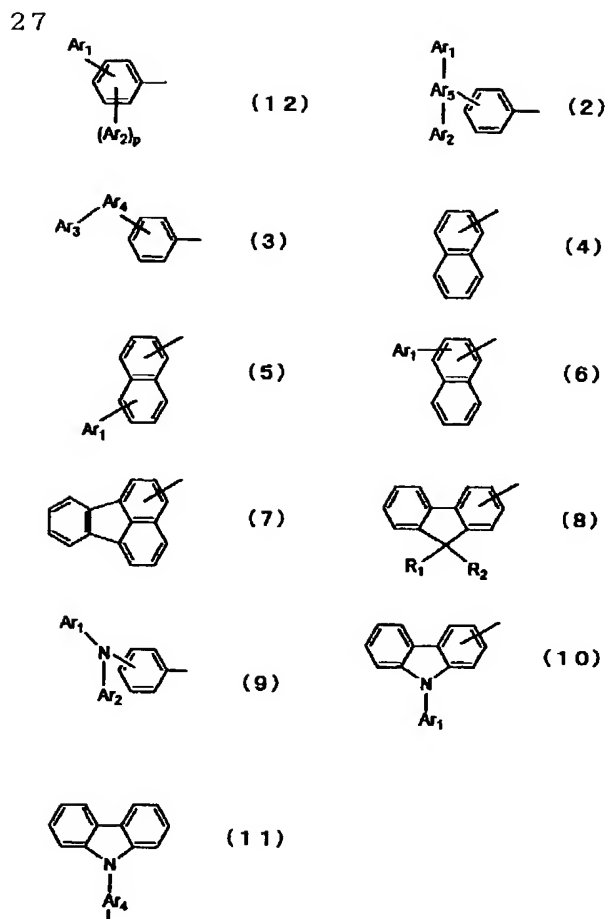


【0032】上記一般式(B)において、 $A'$  は、下記一般式(2)~(12)から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されていてもよい。但し、Bがアリールアミノ基で置換されている場合※

※は、 $A'$  はアリールアミノ基で置換されたフェニル基ではない。

【0033】

【化7】



【0034】(2)～(12)式中、 $Ar_1 \sim Ar_5$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数6～30のアリール基、 $Ar_4$  は置換もしくは無置換の炭素数6～30のアリーレン基、 $Ar_5$  は置換もしくは無置換の炭素数6～30の3価の芳香族残基である。 $R_1$  及び $R_2$  は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～40のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数5～40のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数5～40の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数2～40の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数7～40のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数6～40のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数3～40のシリル基、又はカルボキシル基である。また、 $Ar_1$  と $Ar_2$  及び $R_1$  と $R_2$  は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。式(12)の $p$ は、0又は1である。

【0035】一般式(B)の(2)～(12)式におけ\*

\* $Ar_1 \sim Ar_5$ 、 $R_1$  及び $R_2$  の具体例は、一般式(A)の(1)～(11)式における $Ar_1 \sim Ar_5$ 、 $R_1$  及び $R_2$  と同様である。

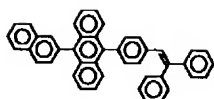
【0036】一般式(A)及び(B)の各基における置換基の例としては、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、置換もしくは無置換アミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルケニル基、置換もしくは無置換のシクロアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、置換もしくは無置換のアラルキル基、置換もしくは無置換のアリールオキシ基、置換もしくは無置換のアルコシカルボニル基、カルボキシル基等が挙げられる。また、一般式(A)における式(1)～(11)、及び一般式(B)における式(2)～(12)は、それぞれ独立に、炭素数1～30のアルキル基、又は炭素数5～30のシクロアルキル基で置換されていると好ましい。

【0037】本発明の一般式(A)及び(B)で表される新規芳香族化合物の具体例を以下に示すが、これら例示化合物に限定されるものではない。

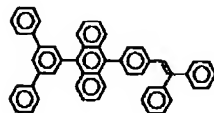
【化8】

29

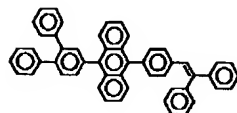
(A1)



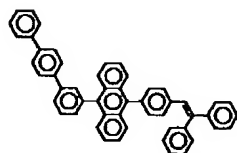
(A2)



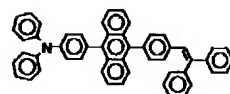
(A3)



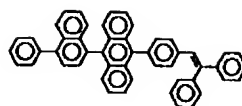
(A4)



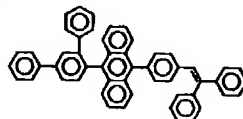
(A5)



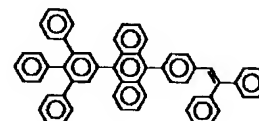
(A6)



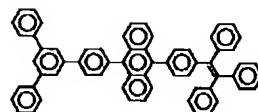
(A7)



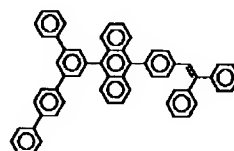
(A8)



(A9)



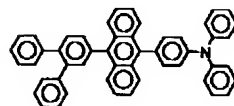
(A10)



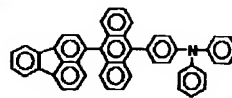
【0038】

\* \* 【化9】

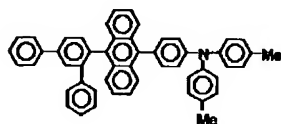
(A11)



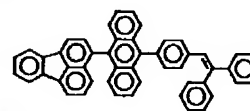
(A16)



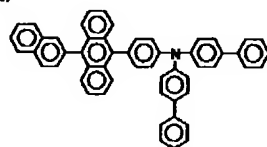
(A12)



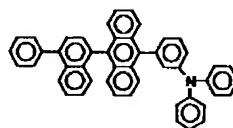
(A17)



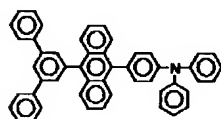
(A13)



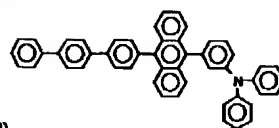
(A18)



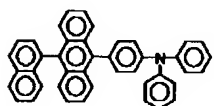
(A14)



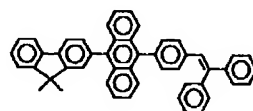
(A19)



(A15)



(A20)



【0039】

※50※ 【化10】



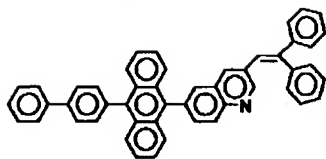
(17)

特開2003-306454

32

31

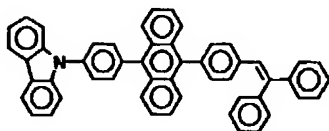
(A21)



\*【0040】

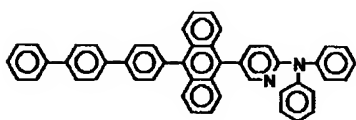
【化11】

(A22)

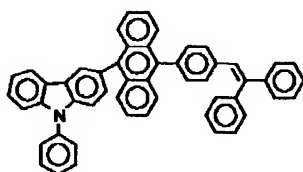


10

(A23)



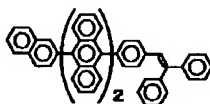
(A24)



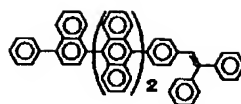
20

\*

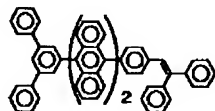
(B1)



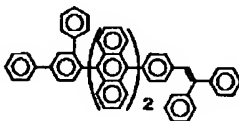
(B6)



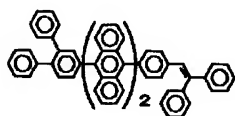
(B2)



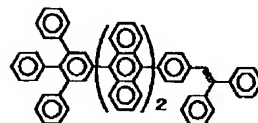
(B7)



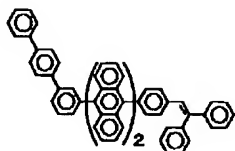
(B3)



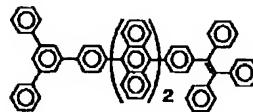
(B8)



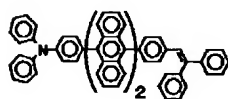
(B4)



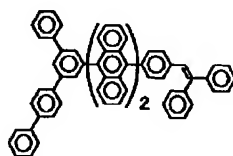
(B9)



(B5)

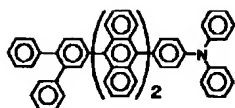


(B10)

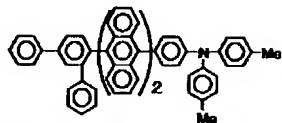


【0041】

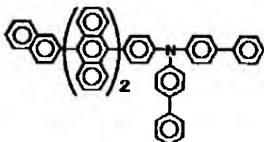
※50※【化12】

33  
(B11)

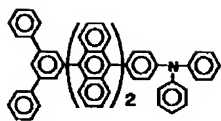
(B12)



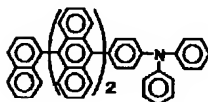
(B13)



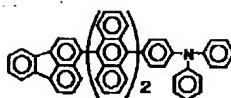
(B14)



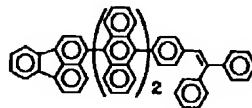
(B15)



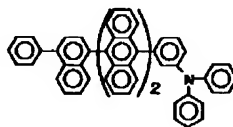
(B16)



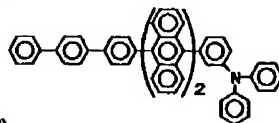
(B17)



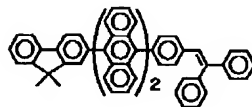
(B18)



(B19)



(B20)

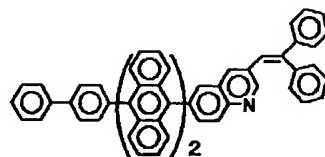


【0042】

【化13】

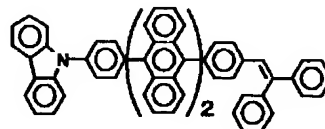
\*  
\*

(B21)

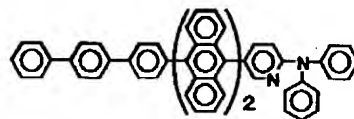


30

(B22)

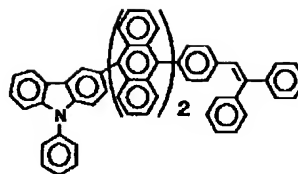


(B23)



40

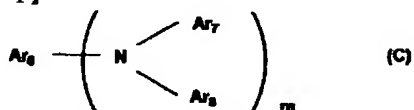
(B24)



香族化合物は、有機EL素子用材料として使用することが好ましい。本発明の有機EL素子は、陰極と陽極間に少なくとも発光層を含む一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機エレクトロルミネッセンス素子において、該有機薄膜層の少なくとも1層が、前記一般式(A)又は(B)の芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有する。前記有機薄膜層が、電子輸送層及び/又は正孔輸送層を有し、該電子輸送層及び/又は正孔輸送層が、前記一般式(A)又は(B)の芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有すると好ましい。

【0044】また、前記発光層が、さらにアリールアミン化合物及び/又はスチリルアミン化合物を含有すると好ましい。アリールアミン化合物としては、下記一般式(C)で表されるアリールアミン化合物が好ましい。

【化14】



(式中、Ar<sub>6</sub>は、炭素数が6~40の芳香族基であり、Ar<sub>7</sub>及びAr<sub>8</sub>は、それぞれ独立に、水素原子又は炭素数が6~20の芳香族基である。mは1~4の整数である。)

【0045】Ar<sub>6</sub>の炭素数が6~40の芳香族基のうち、好ましい核原子数6~40のアリール基としては、フェニル、ナフチル、アントラニル、フェナンスリル、ビレニル、コロニル、ピフェニル、ターフェニル、ピローリル、フラニル、チオフフェニル、ベンゾチオフフェニル、オキサジアゾリル、ジフェニルアントラニル、インドリル、カルバゾリル、ピリジル、ベンゾキノリル、フルオランテニル、アセナフトフルオランテニル等が挙げられる。また、好ましい核原子数6~40のアリーレン基としては、フェニレン、ナフチレン、アントラニレン、フェナンスリレン、ビレニレン、コロニレン、ピフェニレン、ターフェニレン、ピローリレン、フラニレン、チオフフェニレン、ベンゾチオフフェニレン、オキサジアゾリレン、ジフェニルアントラニレン、インドリレン、カルバゾリレン、ピリジレン、ベンゾキノリレン、フルオランテニレン、アセナフトフルオランテニレン等が挙げられる。

【0046】なお、炭素数が6~40の芳香族基は、さらに置換基により置換されていてもよく、好ましい置換基としては、炭素数1~6のアルキル基(エチル基、メチル基、i-プロピル基、n-プロピル基、s-ブチル基、t-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等)、炭素数1~6のアルコキシ基(エトキシ基、メトキシ基、i-プロポキシ基、n-プロポキシ基、s-ブトキシ基、t-ブトキシ基、ペントキシ基、ヘキシルオキシ基、シクロペントキ

シ基、シクロヘキシルオキシ基等)、核原子数6~40のアリール基、核原子数6~40のアリール基で置換されたアミノ基、核原子数6~40のアリール基を有するエステル基、炭素数1~6のアルキル基を有するエステル基、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子が挙げられる。また、Ar<sub>7</sub>及びAr<sub>8</sub>の炭素数が6~20の芳香族基としては、Ar<sub>6</sub>の炭素数が6~40の芳香族基のうち炭素数が6~20のものが挙げられる。前記アリールアミン化合物の例としては、トリフェニルアミン、ジフェニルナフチルアミン、ジフェニルビレニルアミン等が挙げられる。

【0047】スチリルアミン化合物としては、下記一般式(D)で表されるスチリルアミン化合物が好ましい。

【化15】



【0048】(式中、Ar<sub>9</sub>は、フェニレン、ピフェニレン、ターフェニレン、スチルベンジスチリルアリーレンよりなる2価の基であり、Ar<sub>10</sub>及びAr<sub>11</sub>は、それぞれ独立に、水素原子又は炭素数が6~30の芳香族基であり、Ar<sub>9</sub>、Ar<sub>10</sub>及びAr<sub>11</sub>は置換されていてもよく、Ar<sub>10</sub>及びAr<sub>11</sub>の少なくとも一方がスチリル基で置換されている。nは、1~4の整数である。) Ar<sub>9</sub>、Ar<sub>10</sub>及びAr<sub>11</sub>の置換基としては、前記一般式(C)のAr<sub>6</sub>で挙げたものと同様のものが挙げられる。

【0049】本発明における有機EL素子の素子構造の具体例としては、電極間に有機薄膜層を1層あるいは2層以上積層した構造であり、(陽極、発光層、陰極)、(陽極、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、陰極)、(陽極、正孔輸送層、発光層、陰極)、(陽極、発光層、電子輸送層、陰極)等の構造が挙げられる。本発明における芳香族化合物は上記のどの有機薄膜層に用いられてもよく、他の正孔輸送材料、発光材料、電子輸送材料にドーパさせることも可能である。

【0050】また、本発明の有機EL素子の好ましい形態に、電子を輸送する領域又は陰極と有機薄膜層の界面領域に、還元性ドーパントを含有する素子がある。ここで、還元性ドーパントとは、電子輸送性化合物を還元ができる物質と定義される。したがって、一定の還元性を有するものであれば、様々なものが用いられ、例えば、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物または希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属の有機錯体、アルカリ土類金属の有機錯体、希土類金属の有機錯体からなる群から選択される少なくとも一つの物質を好適に使用することができる。

好ましい還元性ドーパントとしては、Na（仕事関数：2.36eV）、K（仕事関数：2.28eV）、Rb（仕事関数：2.16eV）およびCs（仕事関数：1.95eV）からなる群から選択される少なくとも一つのアルカリ金属や、Ca（仕事関数：2.9eV）、Sr（仕事関数：2.0~2.5eV）、及びBa（仕事関数：2.52eV）からなる群から選択される少なくとも一つのアルカリ土類金属が挙げられ、仕事関数が2.9eV以下のものが特に好ましい。これらのうち、より好ましい還元性ドーパントは、K、Rb及びCsからなる群から選択される少なくとも一つのアルカリ金属であり、さらに好ましくは、Rb又はCsであり、最も好ましいのは、Csである。これらのアルカリ金属は、特に還元能力が高く、電子注入域への比較的少量の添加により、有機EL素子における発光輝度の向上や長寿命化が図られる。また、仕事関数が2.9eV以下の還元性ドーパントとして、これら2種以上のアルカリ金属の組み合わせも好ましく、特に、Csを含んだ組み合わせ、例えば、CsとNa、CsとK、CsとRbあるいはCsとNaとKとの組み合わせであることが好ましい。Csを組み合わせることで、還元能力を効率的に発

揮することができ、電子注入域への添加により、有機EL素子における発光輝度の向上や長寿命化が図られる。

【0051】本発明の有機EL素子は、陰極と有機薄膜層の間に絶縁体や半導体で構成される電子注入層をさらに設けても良い。この時、電流のリークを有効に防止して、電子注入性を向上させることができる。このような絶縁体としては、アルカリ金属カルコゲナイド、アルカリ土類金属カルコゲナイド、アルカリ金属のハロゲン化合物及びアルカリ土類金属のハロゲン化合物からなる群から選択される少なくとも一つの金属化合物を使用するのが好ましい。電子注入層がこれらのアルカリ金属カルコゲナイド等で構成されていれば、電子注入性をさらに向上させることができる点で好ましい。具体的に、好ましいアルカリ金属カルコゲナイドとしては、例えば、 $\text{Li}_2\text{O}$ 、 $\text{LiO}$ 、 $\text{Na}_2\text{S}$ 、 $\text{Na}_2\text{Se}$ 、 $\text{NaO}$ 等が挙げられ、好ましいアルカリ土類金属カルコゲナイドとしては、例えば、 $\text{CaO}$ 、 $\text{BaO}$ 、 $\text{SrO}$ 、 $\text{BeO}$ 、 $\text{BaS}$ 、 $\text{CaSe}$ が挙げられる。また、好ましいアルカリ金属のハロゲン化合物としては、例えば、 $\text{LiF}$ 、 $\text{NaF}$ 、 $\text{KF}$ 、 $\text{LiCl}$ 、 $\text{KCl}$ 、 $\text{NaCl}$ 等が挙げられる。また、好ましいアルカリ土類金属のハロゲン化合物としては、例えば、 $\text{CaF}_2$ 、 $\text{BaF}_2$ 、 $\text{SrF}_2$ 、 $\text{MgF}_2$ 、 $\text{BeF}_2$ 等のフッ化物や、フッ化物以外のハロゲン化合物が挙げられる。

【0052】電子輸送層を構成する半導体としては、Ba、Ca、Sr、Yb、Al、Ga、In、Li、Na、Cd、Mg、Si、Ta、Sb及びZnの少なくとも一つの元素を含む酸化物、窒化物又は酸化窒化物等の一種単独又は二種以上の組み合わせが挙げられる。ま

た、電子輸送層を構成する無機化合物が、微結晶又は非晶質の絶縁性薄膜であることが好ましい。電子輸送層がこれらの絶縁性薄膜で構成されていれば、より均質な薄膜が形成されるために、ダークスポット等の画素欠陥を減少させることができる。なお、このような無機化合物としては、上述したアルカリ金属カルコゲナイド、アルカリ土類金属カルコゲナイド、アルカリ金属のハロゲン化合物およびアルカリ土類金属のハロゲン化合物等が挙げられる。

【0053】本発明の有機EL素子の陽極は、正孔を正孔輸送層又は発光層に注入する役割を担うものであり、4.5eV以上の仕事関数を有することが効果的である。本発明に用いられる陽極材料の具体例としては、酸化インジウム錫合金（ITO）、酸化錫（NESA）、金、銀、白金、銅等が適用できる。また陰極としては、電子輸送層又は発光層に電子を注入する目的で、仕事関数の小さい材料が好ましい。本発明の有機EL素子の各層の形成方法は特に限定されず、従来公知の真空蒸着法、スパインコーティング法等による形成方法を用いることができる。本発明の有機EL素子に用いる、前記一般式（A）又は（B）で表される化合物を含有する有機薄膜層は、真空蒸着法、分子線蒸着法（MBE法）あるいは溶媒に溶解した溶液のディッピング法、スパインコーティング法、キャスト法、バーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。本発明の有機EL素子の各有機薄膜層の膜厚は特に制限されないが、一般に膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、逆に厚すぎると高い印加電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常は数nmから1 $\mu\text{m}$ の範囲が好ましい。

【0054】以上のように、有機EL素子の有機薄膜層に本発明の新規芳香族化合物を用いることにより、発光輝度及び発光効率が高く、色純度が高く、青色系に発光し、さらに高温安定性に優れた有機EL素子を得ることができ、この有機EL素子は、例えば電子写真感光体、壁掛けテレビ用フラットパネルディスプレイ等の平面発光体、複写機、プリンター、液晶ディスプレイのバックライト又は計器類等の光源、表示板、標識灯、アクセサリ等に好適に用いられる。

【0055】

【実施例】次に、実施例を用いて本発明をさらに詳しく説明するが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。

合成例1（化合物（A1）の合成）

（1）9-(2-ナフチル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、9-プロモアントラセン(3g, 12mmol)、2-ナフタレンボロン酸(2.4g, 14mmol, 1.2eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.28g, 0.24mmol, 2%Pd)をジメトキシエタン(40ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(4.5g, 42mmol, 3eq/20ml)を加えて

10時間還流した。反応混合物をろ別し、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体を得た。これを、沸騰ジメトキシエタン(30ml)に懸濁し、放冷後、ろ別、ジメトキシエタン、アセトンで洗浄して灰色固体(82%, crude)を得た。これをショートカラム(シリカゲル/ジクロロメタン)で精製して淡黄色固体(2.7g, 収率 74%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMRにより9-(2-ナフチル)アントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.2-7.7 (9H, m), 7.8-8.1 (6H, m), 8.51 (1H, s).

(2) 9-ブromo-10-(2-ナフチル)アントラセンの合成  
9-(2-ナフチル)アントラセン(2.7g, 8.9mmol)を無水(N,N-ジメチルホルムアミド) DMF(50ml)に懸濁し、(N-ブromosuccinimide) NBS(1.7g, 9.6mmol, 1.1eq)の無水DMF溶液(6ml)を加えて、室温で10時間攪拌し、一晩放置した。反応混合物を水(50ml)で希釈し、固体をろ別、メタノールで洗浄して淡黄色固体(3.2g, 収率 94%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMRにより9-ブromo-10-(2-ナフチル)アントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.2-7.7 (9H, m), 7.8-8.1 (4H, m), 8.62 (2H, d, J=8Hz).

(3) 9-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)-10-(2-ナフチル)アントラセン(化合物(A1))の合成  
Ar雰囲気下、9-ブromo-10-(2-ナフチル)アントラセン(3.2g, 8.4mmol)、4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸(2.8g, 9.3mmol, 1.1eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.19g, 0.16mmol, 2%Pd)をトルエン(30ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(3g, 28mmol, 3eq/15ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、トルエン、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体(3.7g)を得た。これを沸騰トルエン(40ml)に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体(3.4g, 収率 73%)を得た。このものの<sup>1</sup>H-NMRの測定結果は以下のものであった。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.15 (1H, s), 7.2-7.4 (17H, m), 7.5-7.8 (8H, m), 7.8-8.1 (4H, m).

さらに、得られた固体(3.4g)を340 °C/10<sup>-6</sup>Torrで1時間昇華精製することにより淡黄色固体(2.9g)を得た。このものは、FDMS(フィールドディソープションマスマス分析)により目的物(A1)であることを確認した。また、エネルギーギャップE<sub>g</sub>、イオンポテンシャルI<sub>p</sub>及びガラス転移温度T<sub>g</sub>の測定結果を以下に示す。

FDMS, calcd for C<sub>44</sub>H<sub>30</sub>=558, found m/z=558 (M<sup>+</sup>, 100).

λ<sub>max</sub>, 397, 378, 359nm (PhMe)

F<sub>max</sub>, 438nm (PhMe, λ<sub>ex</sub>=397nm)

I<sub>p</sub>=5.71eV (100nW, 27Y/eV)

T<sub>g</sub>=108°C.

【0056】合成例2(化合物(A2)の合成)

(1) 9-(3,5-ジブromoフェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、9-ヨードアントラセン(8.7g, 29mmol, 1.1eq)、3,5-ジブromoフェニルボロン酸(7.3g, 26mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.67g, 0.58mmol, 2%Pd)をトルエン(80ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(8.3g, 78mmol, 3eq/40ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をから有機層を分取、飽和食塩水で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して黄色固体を得た。これをジクロロメタン(20ml)に懸濁し、固体をろ別して、ジクロロメタン+ヘキサンで洗浄して淡黄色固体(5.1g, 収率 48%, 1<sup>st</sup> crop)を得た。ろ液をカラムクロマトグラフィ(シリカゲル/ヘキサン、ヘキサン+5%ジクロロメタン)で精製して淡黄色固体(4.2g, 収率 39%, 2<sup>nd</sup> crop)を得た。合計、淡黄色固体(9.3g, 収率 87%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMRにより9-(3,4-ジブromoフェニル)アントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.3-7.6 (8H, m), 7.85 (1H, t, J=2Hz), 8.0-8.1 (2H, m), 8.49 (1H, s).

(2) 9-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、9-(3,5-ジブromoフェニル)アントラセン(5g, 12mmol)、フェニルボロン酸(4.4g, 36mmol, 3eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.55g, 0.48mmol, 2%Pd)をトルエン(100ml)に溶かし、2M炭酸ナトリウム水溶液(11g, 0.10mol, 3eq/50ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、ろ液から有機層を分取、飽和食塩水(50ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して黒色オイルを得た。これをカラムクロマトグラフィ(シリカゲル/ヘキサン、ヘキサン+3%ジクロロメタン、最後にヘキサン+10%ジクロロメタン)で精製して淡黄色アモルファス固体(3.6g, 74%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMR及びFDMSにより9-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.3-7.6 (10H, m), 7.7-7.9 (8H, m), 8.01 (1H, s), 8.05 (2H, dd, J=9Hz, 2Hz), 8.52 (1H, s).

FDMS, calcd for C<sub>32</sub>H<sub>22</sub>=406, found m/z=406 (M<sup>+</sup>, 100).

【0057】(3) 9-ブromo-10-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセンの合成

9-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセン(3.6g, 8.9mmol)を無水DMF(60ml)に懸濁し、NBS(1.9g, 11mmol, 1.2eq)の無水DMF溶液(7ml)を加えて、室温で10時間攪拌し、一晩放置した。反応混合物を水(50ml)で希釈し、固体をろ別、メタノールで洗浄して淡黄色固体(3.9g, 収率 90%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMRにより9-ブromo-10-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.3-7.9 (18H, m), 8.01 (1H,

## 41

t, J=2Hz), 8.62 (2H, d, J=9Hz).

(4) 9-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)-10-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセン(化合物(A2))の合成

Ar雰囲気、9-ブロモ-10-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセン(3.9g, 8.0mmol)、4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸(2.7g, 9.0mmol, 1.1eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.18g, 0.16mmol, 2%Pd)をトルエン(30ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(2.9g, 27mmol, 3eq/15ml)を加えて10時間還流した。反応混合物から有機層を分取、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して淡褐色オイルを得た。これをカラムクロマトグラフィ(シリカゲル/ヘキサン+10%ジクロロメタン、ヘキサン+20%ジクロロメタン)で精製して白色固体(4.3g, 収率81%)を得た。このものの<sup>1</sup>H-NMRの測定結果は以下のようであった。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.15(1H, s), 7.2-7.5 (24H, m), 7.7-7.9 (10H, m), 8.02 (1H, t, J=2Hz)。

さらに、得られた固体(4.3g)を360℃/10<sup>-6</sup>Torrで1時間昇華精製することにより淡黄色固体(3.2g)を得た。このものは、FDMSにより目的物(A2)であることを確認した。また、Eg、Ip及びTgの測定結果を以下に示す。

FDMS, calcd for C<sub>52</sub>H<sub>36</sub>=660, found m/z=660 (M<sup>+</sup>, 100).

λ<sub>max</sub>, 397, 377, 359nm (PhMe)

F<sub>max</sub>, 435nm (PhMe, λ<sub>ex</sub>=397nm)

Ip=5.82eV (100mW, 60Y/eV)

Tg=120℃.

【0058】合成例3(化合物(A3)の合成)

(1) 9-(3,4-ジクロロフェニル)アントラセンの合成  
Ar雰囲気下、3,4-ジクロロフェニルボロン酸(2.7g, 14mmol, 1.1eq)、9-ブロモアントラセン(3.3g, 13mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.3g, 0.26mmol, 2%Pd)をトルエン(40ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(4.5g, 42mmol, 3eq/20ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別してPd黒を除き、ろ液から有機層を分取、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して淡褐色オイルを得た。これに少量のメタノールを加えてフラスコの壁をこすると結晶化したので、ろ別し、メタノールで洗浄して淡黄色固体(3.7g, 収率88%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMRにより9-(3,4-ジクロロフェニル)アントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.2-7.7 (9H, m), 8.02 (2H, dd, J=7Hz, 2Hz), 8.48 (1H, s).

(2) 9-(3,4-ジフェニルフェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、フェニルボロン酸(3.6g, 30mmol, 2.7eq)

## 42

、9-(3,4-ジクロロフェニル)アントラセン(3.7g, 11mmol)、ジクロロビス(トリフェニルホスフィン)ニッケル(II)(0.72g, 1.1mmol, 5%Ni)、トリフェニルホスフィン(0.58g, 2.2mmol, 2eq to Ni)、リン酸カリウム水和物(16g, 60mmol, 2eq)を無水トルエン(80ml)に懸濁し、80℃で10時間加熱した。反応混合物に水(50ml)を加え、不溶物をろ別した。ろ液から有機層を分取し、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して淡褐色オイルを得た。これをカラムクロマトグラフィ(シリカゲル/ヘキサン+10%ジクロロメタン、ヘキサン+20%ジクロロメタン、最後にヘキサン+30%ジクロロメタン)で精製して白色固体(3.7g, 収率83%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMR及びFDMSにより9-(3,4-ジフェニルフェニル)アントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.1-7.7 (17H, m), 7.8-8.1 (4H, m), 8.49 (1H, s).

FDMS, calcd for C<sub>32</sub>H<sub>22</sub>=406, found m/z=406 (M<sup>+</sup>, 100).

【0059】(3) 9-(3,4-ジフェニルフェニル)-10-ブロモアントラセンの合成

9-(3,4-ジフェニルフェニル)アントラセン(3.7g, 9.1mmol)を無水DMF(50ml)に懸濁し、NBS(1.8g, 10mmol, 1.1eq)の無水DMF溶液(10ml)を加えて、50℃で5分間加熱して反応混合物を均一に溶かした。その後、室温で4時間攪拌し、一晚放置した。反応混合物を水(50ml)で希釈し、固体をろ別、メタノールで洗浄して淡黄色固体(4.2g, 収率95%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMRにより9-(3,4-ジフェニルフェニル)-10-ブロモアントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.2-7.7 (17H, m), 7.85 (2H, d, J=8Hz), 8.61 (2H, d, J=8Hz).

(4) 9-(3,4-ジフェニルフェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセン(化合物(A3))の合成

Ar雰囲気下、9-(3,4-ジフェニルフェニル)-10-ブロモアントラセン(3.0g, 6.2mmol)、4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸(2.0g, 6.7mmol, 1.1eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.14g, 0.12mmol, 2%Pd)をトルエン(20ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(2.1g, 20mmol, 3eq/10ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体(3.7g)を得た。これを沸騰トルエン(40ml)に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体(3.6g, 収率88%)を得た。このものの<sup>1</sup>H-NMRの測定結果は以下のようであった。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.0-7.9 (36H, m), all-H.

さらに、得られた固体(3.6g)を340℃/10<sup>-6</sup>Torrで1時間昇華精製することにより淡黄色固体(2.1g)を得た。このものは、FDMSにより目的物(A3)であることを

確認した。また、Eg、Ip及びTgの測定結果を以下に示す。

FDMS, calcd for  $C_{52}H_{36}=660$ , found  $m/z=660$  ( $M^+$ , 100).

$\lambda_{max}$ , 398, 378, 359nm (PhMe)

$F_{max}$ , 437nm (PhMe,  $\lambda_{ex}=398nm$ )

$I_p=5.82eV$  (100nW, 64Y/eV)

$T_g=122^\circ C$ .

【0060】合成例4 (化合物(A4))の合成

(1) 9-(3-クロロフェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、3-クロロフェニルボロン酸(3.3g, 21mmol, 1.1eq)、9-ブロモアントラセン(5.0g, 19mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.5g, 0.43mmol, 2%Pd)をトルエン(60ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(6.8g, 64mmol, 3eq/35ml)を加えて10時間還流した。反応混合物から有機層を分取、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して黄色オイルを得た。これをカラムクロマトグラフィ(シリカゲル/ヘキサン+5%ジクロロメタン)で精製して淡黄色固体(5.2g, 収率 95%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMRにより9-(3-クロロフェニル)アントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR ( $CDCl_3$ , TMS)  $\delta$  7.2-7.7 (10H, m), 7.7-7.8 (2H, m), 8.48 (1H, s).

(2) 9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、4-ビフェニルボロン酸(3.6g, 18mmol, 1.3eq)、9-(3-クロロフェニル)アントラセン(4.1g, 14mmol)、ジクロロ(1,1'-ビス(ジフェニルホスフィン)フェロセン)ニッケル(II)(0.3g, 0.44mmol, 3%Ni)、無水リン酸カリウム(10g, 47mmol, 2.7eq)を無水ジオキサン(70ml)に懸濁し、90℃で7時間加熱した。反応混合物に水(50ml)とトルエン(100ml)を加え、有機層を分取し、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して淡褐色固体を得た。これを沸騰エタノール(50ml)+トルエン(10ml)に懸濁し、放冷後、ろ別してエタノールで洗浄して白色固体(4.8g, 収率 84%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMRにより9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)アントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR ( $CDCl_3$ , TMS)  $\delta$  7.3-7.8 (19H, m), 8.03 (2H, d,  $J=7Hz$ ), 8.49 (1H, s).

【0061】(3) 9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)-10-ブロモアントラセンの合成

9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)アントラセン(4.8g, 12mmol)を無水DMF(70ml)に懸濁し、NBS(2.3g, 13mmol, 1.1eq)の無水DMF溶液(15ml)を加えて、40℃で15分間加熱して反応混合物を均一に溶かした。その後、室温で7時間攪拌し、一晩放置した。反応混合物を水(50ml)で希釈し、固体をろ別、メタノールで洗浄して淡黄色固体(5.2g, 収率 89%)を得た。このもの

は、<sup>1</sup>H-NMRにより9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)-10-ブロモアントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR ( $CDCl_3$ , TMS)  $\delta$  7.3-7.8 (19H, m), 8.61 (2H, d,  $J=9Hz$ ).

(4) 9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセン(化合物(A4))の合成

Ar雰囲気下、9-(3,4-ジフェニルフェニル)-10-ブロモアントラセン(3.0g, 6.2mmol)、4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸(2.0g, 6.7mmol, 1.1eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.14g, 0.12mmol, 2%Pd)をトルエン(20ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(2.1g, 20mmol, 3eq/10ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体を得た。これを沸騰トルエン(30ml)に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体(3.0g, 収率 73%)を得た。このものの<sup>1</sup>H-NMRの測定結果は以下のものであった。

<sup>1</sup>H-NMR ( $CDCl_3$ , TMS)  $\delta$  7.15 (1H, s), 7.2-7.4 (22H, m), 7.6-7.8 (13H, m).

さらに、得られた固体(3.0g)を340℃/10<sup>-6</sup>Torrで1時間昇華精製することにより淡黄色固体(2.6g)を得た。このものは、FDMSにより目的物(A4)であることを確認した。また、Eg、Ip及びTgの測定結果を以下に示す。

FDMS, calcd for  $C_{52}H_{36}=660$ , found  $m/z=660$  ( $M^+$ , 100).

$\lambda_{max}$ , 397, 377, 358nm (PhMe)

$F_{max}$ , 434nm (PhMe,  $\lambda_{ex}=397nm$ )

$I_p=5.83eV$  (100nW, 82Y/eV)

$T_g=115^\circ C$ .

【0062】合成例5 (化合物(A5))の合成

(1) 9-(4-クロロフェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、4-クロロフェニルボロン酸(5.0g, 32mmol, 1.1eq)、9-ブロモアントラセン(7.5g, 29mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.7g, 0.61mmol, 2%Pd)をトルエン(100ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(10g, 94mmol, 3eq/50ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別してPd黒を除き、ろ液から有機層を分取、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して白色固体を得た。これを沸騰エタノール(50ml)に懸濁し、放冷後ろ別、エタノールで洗浄して白色固体(7.7g, 収率 92%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMRにより9-(4-クロロフェニル)アントラセンと同定された。

<sup>1</sup>H-NMR ( $CDCl_3$ , TMS)  $\delta$  7.2-7.7 (10H, m), 8.02 (2H, dd,  $J=7Hz$ , 2Hz), 8.48 (1H, s).

(2) 9-(4-クロロフェニル)-10-ブロモアントラセンの合成

9-(4-クロロフェニル)アントラセン(4.0g, 14mmol)

を無水DMF(60ml)に懸濁し、NBS(2.5g, 14mmol, 1 eq)の無水DMF溶液(10ml)を加えて、室温で7時間攪拌し、一晩放置した。反応混合物を水(70ml)で希釈し、固体をろ別、メタノールで洗浄して淡黄色固体(4.6g, 収率 89%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMRにより9-(4-クロロフェニル)-10-ブロモアントラセンと同一とされた。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.3-7.7 (10H, m), 8.60 (2H, d, J=9Hz).

【0063】(3) 9-(4-クロロフェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセンの合成  
Ar雰囲気下、9-(4-クロロフェニル)-10-ブロモアントラセン(2.0g, 5.4mmol)、4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸(1.8g, 6.0mmol, 1.1eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.12g, 0.10mmol, 2%Pd)をトルエン(20ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(1.9g, 18mmol, 3eq/10ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体(2.4g, 収率 82%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMRにより9-(4-クロロフェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセンと同一とされた。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.14 (1H, s), 7.2-7.4 (20H, m), 7.5-7.7 (6H, m).

(4) 9-(4-ジフェニルアミノフェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセン(化合物(A5))の合成

Ar雰囲気下、9-(4-クロロフェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセン(2.4g, 4.4mmol)、ジフェニルアミン(0.9g, 5.3mmol, 1.2eq)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)(0.1g, 0.11mmol, 5%Pd)、トリト-ブチルホスフィン/トルエン溶液(66wt%, 0.05ml, 0.16mmol, 0.7eq to Pd)、ナトリウムt-ブトキシド(0.6g, 6.3mmol, 1.4eq)を無水トルエン(20ml)に懸濁し、8時間還流した。反応混合物をろ別し、トルエン、水、メタノールで洗浄して緑色固体を得た。これを沸騰トルエン(40ml)に懸濁し、放冷後、ろ別して緑色固体(2.4g, 81%)を得た。このものの<sup>1</sup>H-NMRの測定結果は以下のようであった。

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, TMS) δ 7.0-7.4 (33H, m), 7.6-7.9 (4H, m).

さらに、得られた固体(2.4g)を360 °C/10<sup>-6</sup>Torrで1時間昇華精製することにより淡黄色固体(1.9g)を得た。このものは、FDMSにより目的物(A3)であることを確認した。また、Eg、Ip及びTgの測定結果を以下に示す。

FDMS, calcd for C<sub>32</sub>H<sub>27</sub>N=675, found m/z=675 (M<sup>+</sup>, 100).

λ<sub>max</sub>, 398, 379, 360, 307nm (PhMe)

F<sub>max</sub>, 457nm (PhMe, λ<sub>ex</sub>=398nm)

Ip=5.73eV (200nm, 16V/eV)

Tg=114°C.

【0064】合成例6(化合物(A11))の合成  
9-(4-ジフェニルアミノフェニル)-10-(3,4-ジフェニルフェニル)アントラセン(化合物(A11))の合成  
Ar雰囲気下、9-(4-クロロフェニル)-10-(3,4-ジフェニルフェニル)アントラセン(2.3g, 4.4mmol)、ジフェニルアミン(0.9g, 5.3mmol, 1.2eq)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)(0.1g, 0.11mmol, 5%Pd)、トリト-ブチルホスフィン/トルエン溶液(66wt%, 0.05ml, 0.16mmol, 0.7eq to Pd)、ナトリウムt-ブトキシド(0.6g, 6.3mmol, 1.4eq)を無水トルエン(20ml)に懸濁し、8時間還流した。反応混合物をろ別し、トルエン、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体を得た。これを沸騰トルエン(40ml)に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体(2.2g, 収率 78%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMR及びFDMSにより化合物(A11)であることを確認した。

【0065】合成例7(化合物(A14))の合成  
9-(4-ジフェニルアミノフェニル)-10-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセン(化合物(A14))の合成  
Ar雰囲気下、9-(4-クロロフェニル)-10-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセン(2.3g, 4.4mmol)、ジフェニルアミン(0.9g, 5.3mmol, 1.2eq)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)(0.1g, 0.11mmol, 5%Pd)、トリト-ブチルホスフィン/トルエン溶液(66wt%, 0.05ml, 0.16mmol, 0.7eq to Pd)、ナトリウムt-ブトキシド(0.6g, 6.3mmol, 1.4eq)を無水トルエン(20ml)に懸濁し、8時間還流した。反応混合物をろ別し、トルエン、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体を得た。これを沸騰トルエン(40ml)に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体(2.5g, 収率 86%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMR及びFDMSにより化合物(A14)であることを確認した。

【0066】合成例8(化合物(A20))の合成  
9-(9,9-ジメチルフルオレン-2-イル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセン(化合物(A20))の合成

Ar雰囲気下、9-(9,9-ジメチルフルオレン-2-イル)-10-ブロモアントラセン(2.8g, 6.2mmol)、4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸(2.0g, 6.7mmol, 1.1eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.14g, 0.12mmol, 2%Pd)をトルエン(20ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(2.1g, 20mmol, 3eq/10ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体を得た。これを沸騰トルエン(30ml)に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体(3.0g, 収率 78%)を得た。このものは、<sup>1</sup>H-NMR及びFDMSにより化合物(A20)であることを確認した。

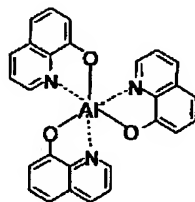
50 【0067】実施例1



25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極付きガラス基板（ジオマティック社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に前記透明電極を覆うようにして膜厚60nmのN,N'-ビス（N,N'-ジフェニル-4-アミノフェニル）-N,N'-β-ナフチル-4,4'-ジアミノ-1,1'-ビフェニル膜（TPD232膜）を成膜した。このTPD232膜は、正孔注入層として機能する。続けて、このTPD232膜上に膜厚20nmのN,N,N',N'-テトラキス（4-ビフェニル）-4,4'-ベンジジン膜（BPTPD膜）を成膜した。このBPTPD膜は正孔輸送層として機能する。さらに、BPTPD膜上に膜厚40nmの上記化合物（A1）を蒸着し成膜した。この膜は、発光層として機能する。この膜上に膜厚10nmの下記A1q膜を成膜した。このA1q膜は、電子注入層として機能する。この後還元性ドーパントであるLi（Li源：サエスゲッター社製）とA1qを二元蒸着させ、電子注入層（陰極）としてA1q:Li膜（膜厚10nm）を形成した。このA1q:Li膜上に金属Alを蒸着させ金属陰極を形成し有機EL素子を形成した。この素子は直流電圧6Vで発光輝度176cd/m<sup>2</sup>、発光効率2.2cd/Aの青色発光が得られた。さらにこの素子を封止後、100℃の恒温槽に500時間放置した後、倍率20倍の実体顕微鏡によって発光面に輝点又は色の変化が生じているなどで欠陥が生じているかを観察し評価する高温保存試験を行った。以上の結果を表1に示す。

【0068】

【化16】



A1q

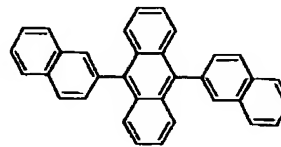
【0069】実施例2~10

実施例1において、化合物（A1）の代わりに表1に記載した化合物を用いた以外は同様にして有機EL素子を作製した。これらの素子の電圧、発光輝度、発光効率、発光色、化合物のガラス転移温度T<sub>g</sub>及び高温保存試験結果を表1に示した。

【0070】比較例1

実施例1において、化合物（A1）の代わりに米国特許第05935721号明細書に記載のアリールアントラセン化合物である下記（C1）を用いた以外は同様にして有機EL素子を作製した。この素子の電圧、発光輝度、発光効率、発光色、化合物のガラス転移温度T<sub>g</sub>及び高温保存試験結果を表1に示した。

【化17】

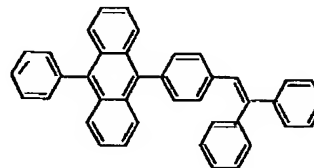


(C1)

【0071】比較例2

実施例1において、化合物（A1）の代わりに特開2000-273056号公報に記載のアリールアントラセン化合物である下記（C2）を用いた以外は同様にして有機EL素子を作製した。この素子の電圧、発光輝度、発光効率、発光色、化合物のガラス転移温度T<sub>g</sub>及び高温保存試験結果を表1に示した。

【化18】

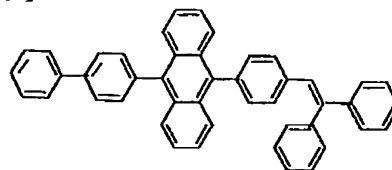


(C2)

【0072】比較例3

実施例1において、化合物（A1）の代わりに特開2000-273056号公報に記載のアリールアントラセン化合物である下記（C3）を用いた以外は同様にして有機EL素子を作製した。この素子の電圧、発光輝度、発光効率、発光色、化合物のガラス転移温度T<sub>g</sub>及び高温保存試験結果を表1に示した。

【化19】



(C3)

【0073】

【表1】

表 1						
実施例の化合物	電圧 (V)	発光輝度 (cd/m <sup>2</sup> )	発光効率 (cd/A)	発光色	化合物のT <sub>g</sub> (°C)	高温保存試験
実施例1 (A1)	6.0	178	2.2	青	108	良好
実施例2 (A2)	6.0	200	2.3	青	120	良好
実施例3 (A3)	6.0	161	3.1	青	122	良好
実施例4 (A4)	6.0	110	2.3	青	115	良好
実施例5 (A5)	6.0	780	2.0	青	114	良好
実施例6 (A6)	6.0	180	2.8	青緑	112	良好
実施例7 (A10)	6.0	250	2.9	青	128	良好
実施例8 (A20)	6.0	180	3.1	青	124	良好
実施例9 (B1)	6.0	260	2.2	青	156	良好
実施例10 (B2)	6.0	313	3.1	青	152	良好
比較例1 (C1)	6.0	120	2.1	青緑	ND	結晶化
比較例2 (C2)	6.0	125	2.1	青	96	結晶化
比較例3 (C3)	6.0	153	2.5	青	109	結晶化

※高温保存試験結果においては、発光面に輝点又は色の変化が生じているなどにより欠陥が生じていない場合を良好とし、輝点、色の変化が生じている場合を結晶化した。T<sub>g</sub>の欄におけるNDはDSC（示差走査熱量測定）により観測されなかったということである。

【0074】表1に示したように、対称性の良いC1を用いた比較例1では、結晶化が生じ発光面に欠陥が生じ、発光色も青緑色であり青色の純度が優れていない。また、比較例2及び3における化合物C2及びC3は分子構造の左右が非対象であるが、結晶化が生じており、T<sub>g</sub>が低いためであると考えられる。本発明の化合物は非対称でありかつT<sub>g</sub>が比較的高いため、高温保存試験の結果は良好であった。

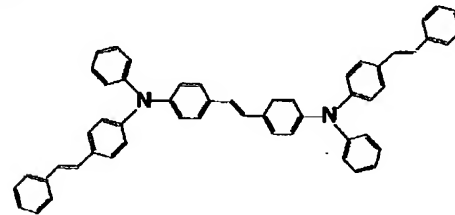
#### 【0075】実施例11

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極付きガラス基板（旭硝子社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に前記透明電極を覆うようにして膜厚60nmのTPD232を成膜した。このTPD232膜は、正孔注入層として機能する。続けて、このTPD232膜上に膜厚20nmのBPTPD膜を成膜した。このBPTPD膜は正孔輸送層として機能する。さらに、BPTPD膜上に膜厚40nmの上記化合物（A1）を蒸着し成膜した。この膜は、発光層として機能する。この時同時に下記スチリルアミン系の発光分子（D1）を7重量%添加した。この膜上に膜厚20nmのAlq膜を成膜した。このAlq膜は、電子注入層として機能する。この後還元性ドーパントであるLi（Li源：サエスゲッター社製）とAlqを二元蒸着させ、電子注入層（陰極）としてAlq:Li膜を形成した。この膜上に金属Alを蒸着させ金属陰極を形成し有機EL素子を形成した。この素子は直流電\*

\*圧5.5Vで発光輝度200cd/m<sup>2</sup>、発光効率5.5cd/Aの青色発光が得られた。また、初期輝度500cd/m<sup>2</sup>にて一定電流駆動を行ったところ輝度が半減する時間（半減寿命）は3000時間であった。

【0076】

【化20】



(D1)

#### 【0077】比較例4

実施例1において、化合物（A1）の代わりに米国特許第05935721号明細書に記載のアリールアントラセン化合物である上記（C1）を用いた以外は同様にして有機EL素子を作製した。この素子の電圧、発光輝度、発光効率、発光色、化合物のガラス転移温度T<sub>g</sub>及び高温保存試験結果を表1に示した。この素子は、直流電圧5.5Vで発光輝度180cd/m<sup>2</sup>、発光効率5.0cd/Aの青色発光が得られた。また、初期輝度500cd/m<sup>2</sup>にて一定電流駆動を行ったところ輝度が半減する時間（半減寿命）は1500時間と短かった。

【0078】

【発明の効果】以上詳細に説明したように、本発明の新規芳香族化合物を利用すると、発光輝度及び発光効率が高く、色純度が高く、青色系に発光し、さらに高温安定性に優れた長寿命の有機エレクトロルミネッセンス素子が得られる。このため、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、各種電子機器の光源等として極めて有用である。

フロントページの続き

(51)Int.Cl. <sup>7</sup>		識別記号	F I	ターム(参考)	
C 0 9 K	11/06	6 4 5	C 0 9 K 11/06	6 4 5	
		6 9 0		6 9 0	
H 0 5 B	33/14		H 0 5 B 33/14 33/22		B
	33/22				B
					D
(72)発明者 細川 地潮			Fターム(参考) 3K007 AB02 AB03 AB04 AB11 DB03		
千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地			4H006 AA01 AA03 AB91		